



PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DE CHILE

PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE

PROYECTO FINAL DE CURSO

FIZ1431 ★ FÍSICA COMPUTACIONAL

Un modelo Monte Carlo para el transporte de partículas

Autores:

Juan Manuel González Brantes,
Instituto de Física, UC.

Nicolás Van Sint Jan Campos,
Instituto de Física, UC.

Profesor:

Edgardo Dörner Yaksic

Fecha de entrega:

29 de noviembre de 2018

Índice

1. Resumen	1
2. Introducción	2
2.1. El método Monte Carlo	2
2.2. Modelización del transporte de partículas	3
3. Indumentaria y Metodología	5
3.1. Indumentaria para elaboración de código	5
3.2. Metodología de implementación	5
4. Resultados y Discusión	7
5. Conclusiones	8

Índice de figuras

1. Diagrama de cambio de región	6
2. Ejemplo de historia graficada en la geometría del problema	7

Índice de cuadros

1. Indumentaria utilizada.	5
2. Resultados del modelo	7
3. Restricciones del problema	7

1. Resumen

Mediante la implementación de un programa computacional elaborado en el lenguaje de programación compilado C, se estudió una aplicación directa del método Monte Carlo: la modelización del transporte de partículas a través de estructuras radiactivas de emisión de fotones. Junto con ello, se estimó la probabilidad de transmisión y absorción de las partículas emanadas en el modelo, el que consistió, fundamentalmente, en un núcleo esférico de material fisionable, siendo el lugar de origen de las partículas emanadas, las que pueden atravesar una serie de cascarones esféricos concéntricos al núcleo de material moderador.

2. Introducción

La presente introducción se dividirá en dos partes: la primera, tendrá por objetivo definir el método Monte Carlo, darle un contexto histórico de gestación, para luego ejemplificar su acción mediante una situación; en tanto, la otra tendrá por ánimo tomar una aplicación directa del método, definir un marco teórico apropiado, y ligarlo al objeto de estudio en el presente informe.

2.1. El método Monte Carlo

El método de Monte Carlo –en adelante, MC– es una técnica computacional estadística que tiene la capacidad de replicar numéricamente un modelo físico o matemático en un computador. Es importante señalar que, dada la naturaleza estocástica de estos procesos, se hace necesario el uso de números aleatorios, para así poder muestrearlos a partir de una función de densidad de probabilidad –en adelante, *pdf*–. Así, el MC requiere ser reproducible a gran escala, pues de esta manera, la incertidumbre relativa a los resultados es lo suficientemente pequeña para entregar confiabilidad en la simulación: esto deriva en tiempos muy grandes para poder simular tales procesos. [1]

El contexto histórico del MC tiene su origen en el desarrollo de la bomba atómica, es decir, en los dramáticos sucesos de la Segunda Guerra Mundial, cuya duración es fijada por la historia contemporánea entre 1939 y 1945, pues, en el marco de la utilización de armamento atómico y nuclear, el método nació como una manera de estudiar los procesos fisionables que ocurren en átomos altamente radioactivos. Así, en el Laboratorio Nacional de Los Álamos, Estados Unidos, el trabajo significó la simulación de problemas estocásticos de hidrodinámica en correlato con la difusión de neutrones en el material fisionable, siendo ésta misma difusión la componente aleatoria que precisaba el incipiente modelo: en una primera etapa, John von Neumann y Stanislaw Ulam refinaron este aspecto y los métodos de división de tareas; no obstante, hubo que esperar hasta 1948, cuando Enrico Fermi, Nicholas Metropolis y el mismo Ulam obtuvieran exitosamente estimadores para los autovalores de la Ecuación de Schrödinger para la captura de neutrones en el núcleo usando este método, lo que significó, a todas luces, el nacimiento del método y sus altas proyecciones en simulación de procesos aleatorios. [1]

Un ejemplo de acción del método es considerar aquéllos programas de diseño asistido por computador [2]. Este tipo de programas pueden determinar de forma rápida el

volumen de modelizaciones muy complejas: tales modelizaciones, en general, no tienen una expresión analítica que permita determinar *a priori* su volumen, por lo que una solución es dividir las en pequeñas modelizaciones, cuyos volúmenes sí puedan determinarse. Sin embargo, este procedimiento consume muchos recursos, tanto por dividir la modelización en submodelizaciones, como asimismo el cálculo del volumen de cada submodelización. Es aquí cuando el modelo MC surge como la alternativa más eficiente, robusta y precisa para poder resolver problemas como ese tipo. Dado que, el software sí conoce la expresión analítica de la geometría de la modelización, lo que hará MC es determinar si un punto determinado está dentro del modelo o no, lo que, evidentemente provoca un costo mucho menor que el de determinar un volumen en reiteradas ocasiones. Entonces, para el ejemplo, sea el volumen que se quiere calcular Ω y el volumen a usar Ω' ; MC actuará de la siguiente manera:

- El software pondrá Ω dentro de un volumen conocido Ω' , lo más parecido a Ω .
- Luego, generará un punto aleatorio al interior de Ω' , y registrará si el punto pertenece también a Ω o no. Aquí, MC repetirá tantas veces el procedimiento, lo que conseguirá a la larga, un registro ostensible de puntos, tanto dentro como fuera.
- Finalmente, dado que, la probabilidad de que caiga dentro es proporcional a Ω , entonces la proporción de puntos que están dentro de Ω respecto a la cantidad de puntos generados es la misma proporción de Ω' .

Si, por ejemplo, el 50 % de los puntos están dentro de Ω' , entonces, el modelo ocupa el 50 % de Ω . De aquí, la importancia de que mientras más puntos genere el software, menor será el error de la estimación del volumen.

2.2. Modelización del transporte de partículas

Como se indicó anteriormente, el método provee la aptitud de recrear un experimento por computador y estimar el comportamiento del modelo que se quiere simular: en este espíritu, acá se abogará por definir una aplicación del MC a un problema simplificado de transporte de partículas, sus interacciones y comportamiento en un medio esférico.

En general, una partícula es emanada desde una fuente, la que puede estar fija o bien puede ser material fisionable. Esta fuente está en una posición, dirección y energía aleatorias. Entonces, cada partícula tiene una oportunidad de viajar de manera libre en un medio antes de interactuar con el núcleo. Diferentes tipos de interacciones podrían ocurrir, dependiendo del tipo de partícula y su energía, y la

composición propiamente tal del medio. Así, estas interacciones, las que pueden ser descritas mediante *pdfs* –los que están establecidos usando data nuclear y principios físicos– liderarán la producción de una o más partículas, su propósito, sus fluctuaciones energéticas y su dirección: se dará por terminada la simulación si la partícula se escapa del medio. En un MC, la *historia* de cada partícula de nacimiento en nacimiento es seguida, siendo los conteos de interés esperados estimados mediante la simulación de numerosas historias, evaluando la varianza asociada y las incertidumbres relativas de las mismas.

La ecuación lineal de Boltzmann –en adelante, LBE– representa el balance de partículas en un espacio de fase, el que definimos como $df = d^3r \, dE \, d\Omega$. Así, la LBE independiente del tiempo, dada una fuente fija, se define por:

$$\hat{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\bar{r}, E, \hat{\Omega}) + \Sigma_t(\bar{r}, E) \Psi(\bar{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\bar{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}) \times \Psi(\bar{r}', E', \hat{\Omega}') + S(\bar{r}, E, \hat{\Omega}) \quad (1)$$

donde $\Psi = v(E) n(\bar{r}, E, \hat{\Omega})$ es el flujo angular esperado en el espacio de fases, $v(E)$ es la velocidad de la partícula a una energía E , y n es la densidad de partícula por número en el espacio de fase; $\Sigma_t(\bar{r}, E)$ es el total de secciones eficaces macroscópicas que indican probabilidad por unidad de interacciones núcleo-partícula de todo tipo a una posición \bar{r} y energía E , $\Sigma_s(\bar{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega})$ es la sección eficaz diferencial de *scattering*, indicando la probabilidad por unidad de longitud que sigue un núcleo-partícula chocando a una partícula que irá desde una energía E' a E en un diferencial de energía dE y una dirección Ω' en $d\Omega$ alrededor de Ω , y $S(\bar{r}, E, \hat{\Omega})$ es la densidad de fuente fija en el espacio de fase.

Físicamente, la ecuación (1) es un balance de la tasa de pérdida de partículas (el lado izquierdo) y la tasa de producción de partículas (lado derecho), siendo los términos de la ecuación –que fueron explicados en el párrafo anterior– la representación de los valores esperados (medios) de producción y pérdida de partículas a través de diferentes procesos aleatorios. Así, dado que, la LBE permite modelar el transporte de partículas, se basará en esta ecuación, y sus ecuaciones corolarias para poder modelar en MC la situación pedida.

INDUMENTARIA
Computador
Lenguaje de programación C
Bibliografía y clases teóricas del curso

Cuadro 1: Indumentaria utilizada.

3. Indumentaria y Metodología

En esta sección, se explicará tanto la indumentaria utilizada para la implementación del código como la metodología que se empleó para ajustar la ecuación (1) a un problema esférico.

3.1. Indumentaria para elaboración de código

Para el tratamiento del código –el que ya había sido avanzado en clases del curso– se utilizó la siguiente indumentaria para efectos del estudio del modelo MC y el transporte de partículas:

3.2. Metodología de implementación

En primera instancia, dado que, el código ya tenía un avance previo hecho en clases del curso, había que notar que el mismo estaba implementado para secciones eficaces del tipo prismáticas, vale decir, no había una simetría esférica para un estudio y análisis como el que se pedía en el enunciado del proyecto. Esto significó un punto clave para poder adecuarlo a la realidad del informe, por lo que toda la geometría tuvo que ser cambiada a simetría esférica.

Luego, se eligieron mediante generadores de números pseudoaleatorios un punto dentro del núcleo de material fisionable con probabilidad uniforme de ocurrencia, para así, escoger un vector unitario –también con probabilidad uniforme– que cumpliera el rol de vector director inicial de la partícula: al implementar esto dentro de un ciclo, el programa irá siempre verificando posiciones iniciales y finales de la partícula, definiendo en toda vez este vector y sumándole el camino libre medio para que la partícula experimente *sampling*. En tanto, también había que definir las condiciones de paso por región: la esfera maciza constaba de cuatro regiones: un núcleo y tres cascarones, por lo que se hacía necesario comunicarle a la partícula en qué región

estaba para luego establecer el análisis estadístico pedido.

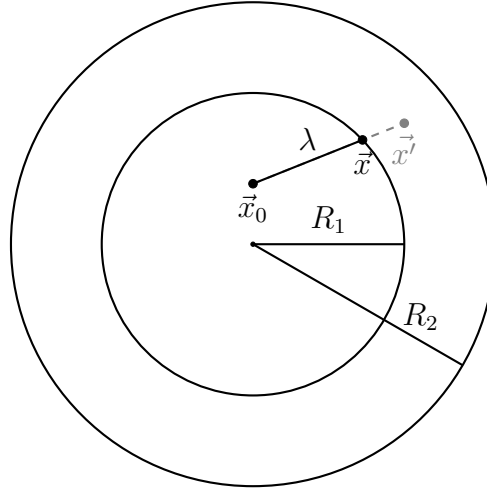


Figura 1: Diagrama de cambio de región

La mayor dificultad en la adaptación del algoritmo radicó en calcular la distancia necesaria que debe recorrer la partícula para llegar a la frontera de la región a la cuál se quiere cambiar (ya que el muestreo de camino libre medio se escapa de la geometría de la región). Esta distancia corresponde a el valor λ presente en la figura 1. Para encontrar este valor hay que resolver la intersección entre la recta definida por el punto inicial \vec{x}_0 y el vector director \vec{u} , con la esfera de radio R_1 , esto es:

$$(x, y, z) = (x_0, y_0, z_0) + \lambda(u, v, w) \quad (2)$$

$$x^2 + y^2 + z^2 = R_1^2 \quad (3)$$

Lo que nos da una ecuación cuadrática para $\lambda \in [0, \infty)$. Esta ecuación es

$$(u^2 + v^2 + w^2)\lambda^2 + 2(ux_0 + vy_0 + wz_0)\lambda + (x_0^2 + y_0^2 + z_0^2 - R_1^2) = 0 \quad (4)$$

Cuya solución está dada por (considerando que $(u^2 + v^2 + w^2) = 1$):

$$\lambda = \frac{-2(ux_0 + vy_0 + wz_0) + \sqrt{4(ux_0 + vy_0 + wz_0)^2 - 4(x_0^2 + y_0^2 + z_0^2 - R_1^2)}}{2} \quad (5)$$

El caso es general para cualquier cambio de región.

4. Resultados y Discusión

La siguiente tabla resume las probabilidades de absorción P_{abs} y transmisión P_{trans} del problema para distintos números de historias simuladas N_{hist} .

N_{hist}	P_{abs}	P_{trans}
1.000	$0,98900 \pm 0,00959$	$0,01100 \pm 0,00233$
100.000	$0,99161 \pm 0,00109$	$0,00839 \pm 0,00027$
10.000.000	$0,99185 \pm 0,00011$	$0,00815 \pm 0,00003$

Cuadro 2: Resultados del modelo

Se recuerda que las restricciones del problema están dadas por enunciado, las cuales son las siguientes:

Región	Σ_t	Σ_a	Espesor
Núcleo	0,05	0,005	0,5
Cascarón 1	0,1	0,01	0,1
Cascarón 2	10,0	0,1	0,1
Cascarón 3	100,0	10,0	0,1

Cuadro 3: Restricciones del problema

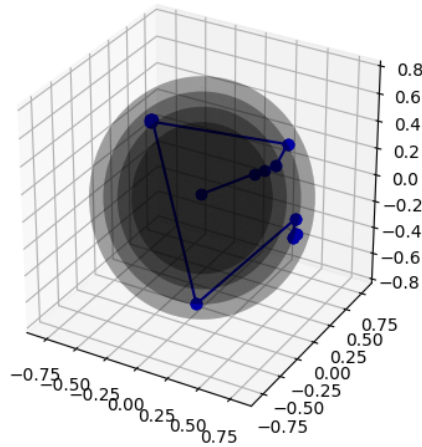


Figura 2: Ejemplo de historia graficada en la geometría del problema

Podemos notar que la probabilidad de absorción es muy grande para los confinamientos dados, lo que se condice con lo esperado, dado que en las capas exteriores el camino libre medio recorrido por la partícula entre cada interacción es muy pequeño, por lo que es muy probable que ocurran muchas interacciones antes de que la partícula escape de la geometría. La probabilidad de absorción, dado que ocurre una interacción, es siempre del 10 % para cada región, entonces lo que limita la transmisión de las partículas es la sección eficaz Σ_t .

Utilizando el *script* adjunto a esta entrega escrito en lenguaje Python, `check.py`, es posible verificar esto. El *script* lo que hace es revisar una historia al azar (entregada solo si el programa principal `main.c` se ajusta para que entregue un *output*) y graficarla en la geometría del problema. En la figura 2 se puede apreciar un *output* del *script* mencionado, podemos ver que a medida que la partícula se aleja del núcleo (y entra a los cascarones más grandes) el número de interacciones aumenta considerablemente, este comportamiento se encuentra en la gran mayoría de las historias simuladas.

Por otro lado, como es de esperarse, mientras mayor es la cantidad de historias simuladas más preciso es el resultado, los errores calculados a base de dispersión estadística de los *batches* de simulación se ajustan de manera consistente a el valor. Se afirma así que, a medida que se aumenta el número de historias, el valor de P_{abs} y P_{trans} convergen cada una a un cierto número, tal y como se esperaría por la Ley de los Grandes Números.

5. Conclusiones

Referencias

- [1] Edgardo Dörner, «Clase 23: Método Monte Carlo», Diapositivas del curso Física Computacional, Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, 2018.
- [2] Dirk P. Kroese, Thomas Taimre, Zdravko I. Botev, «Handbook of Monte Carlo Methods», First Edition, John Wiley & Sons, New Jersey, Estados Unidos de América, 2012.
- [3] Alireza Haghighat, «Monte Carlo Methods for Particle Transport», Primera Edición, CRC Press, Boca Raton, Florida, Estados Unidos de América, 2014.
- [4] Edgardo Dörner, «Clase 24: Transporte Monte Carlo de partículas», Diapositivas del curso Física Computacional, Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, 2018.