

**PROYECTO INTEGRADOR DE LA CARRERA DE
INGENIERÍA NUCLEAR**

**INCORPORACIÓN DE TÉCNICAS DE MUESTREO
MEDIANTE HISTOGRAMAS MULTIDIMENSIONALES
AL CÓDIGO DE SIMULACIÓN DE FUENTES DE
MONTE CARLO KDSOURCE**

**Lucas Ezequiel Ovando
Estudiante**

Dr. Ariel Marquez
Director

Ing. Zoe Prieto
Co-director

Miembros del Jurado
Dr. Edmundo Lopasso
Mg. Norberto Schmidt

10 de Mayo de 2025

Departamento de Física de Reactores y Radiaciones

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A todos por igual

Índice de símbolos

Índice de contenidos

Índice de símbolos	v
Índice de contenidos	vii
Índice de figuras	ix
Índice de tablas	xi
Resumen	xiii
Abstract	xv
1. Introducción	1
1.1. Contexto y motivación	1
1.2. Fuentes distribucionales – base conceptual	1
1.3. Aportes específicos de este trabajo	3
2. Herramientas adicionales	5
2.1. OpenMC	5
2.2. KDSource	6
2.3. Divergencia de Kullback-Leibler (KL)	6
2.4. Formato MCPL	6
2.5. Formato XML	7
2.6. Lenguajes de programación: Python, C y C++	7
3. Metodología para la Generación de Fuentes Monte Carlo Mediante Histogramas Multidimensionales	9
3.1. Introducción general al método	9
3.2. Definición del espacio de fases ($E-r-\Omega$)	9
3.3. Procesamiento del <i>trackfile</i> original	9
3.4. Aproximación de distribuciones mediante histogramas	10
3.5. Mantenimiento de correlaciones mediante macrogrupos	11
3.6. Implementación computacional	11

3.7. Remuestreo de partículas en simulaciones Monte Carlo subsecuentes	12
3.8. Conexión con la implementación computacional	12
4. Aplicación: Canal de vacío rodeado por Agua	15
4.1. Descripción del modelo simulado en OpenMC	15
4.2. Procesamiento del trackfile	16
4.2.1. Metodología del análisis	16
4.2.2. Descripción del trackfile	17
4.2.3. Bineado uniforme de microgrupos y macrogrupos	19
4.2.4. Bineado uniforme de microgrupos y macrogrupos con bordes manuales	22
4.2.5. Bineado adaptativo de microgrupos y macrogrupos	26
4.2.6. Bineado adaptativo de microgrupos y macrogrupos optimizado .	29
4.3. Resultados de la simulación comparativa	29
4.3.1. Validación de tallies y aplicación de técnicas de reducción de varianza	29
4.3.2. Síntesis y conclusiones	29
5. Validación Experimental: Conducto Número 5 del Reactor RA-6	31
5.1. Descripción del caso experimental del RA-6	31
5.2. Optimización del resampling para la fuente experimental	31
5.3. Resultados de simulación en OpenMC y comparación experimental	31
5.3.1. Distribución espacial del flujo en detectores	31
5.3.2. Comparación ^3He : simulación vs. experimento	31
5.4. Discusión sobre resultados y validación	31
A. Implementación Computacional del Método	33
A.1. Código detallado en Python/C++	33
A.2. Pseudocódigo y comentarios	33
A.3. Archivos de configuración XML	33
A.4. Flujo de trabajo práctico	33
Bibliografía	35
Publicaciones asociadas	37
Agradecimientos	39

Índice de figuras

4.1. Distribuciones de x vs y para el <i>trackfile</i> registrado en la primera corrida del tubo de vacío.	18
4.2. Distribuciones de letargia y μ para el <i>trackfile</i> registrado en la primera corrida del tubo de vacío, con escala logarítmica en el eje y. Se observa la presencia de dos poblaciones: una concentrada en $\mu = 1$ y letargia mínima, montada sobre una distribución continua de neutrones colisionados.	18
4.3. Distribuciones de letargia vs μ para el <i>trackfile</i> registrado en la primera corrida del tubo de vacío. Se observa la presencia de un conjunto de neutrones graficados como un pixel en $\mu = 1$ y letargia mínima, indicando la naturaleza discreta de la fuente original. A su vez se observa la presencia de un segundo conjunto de neutrones colisionados, que se distribuyen en el plano de forma continua, con un agrupamiento sobre letargia = 20, indicando la termalización de los neutrones.	19
4.4. Comparación de la distribución de letargia entre el <i>trackfile</i> original y el <i>trackfile</i> remuestreado. Se observa el efecto de la discretización uniforme en la distribución de letargia.	20
4.5. Comparación de la distribución de μ entre el <i>trackfile</i> original y el <i>trackfile</i> remuestreado. Se observa el efecto de la discretización uniforme en la distribución de μ	20
4.6. Distribuciones de x vs y para el <i>trackfile</i> remuestreado utilizando discretización uniforme tanto para macrogrupos como para microgrupos.	21
4.7. Comparación de la distribución de letargia entre el <i>trackfile</i> original y el <i>trackfile</i> remuestreado. Se observa el efecto de separar manualmente los neutrones con letargia mínima.	23
4.8. Comparación de la distribución de μ entre el <i>trackfile</i> original y el <i>trackfile</i> remuestreado. Se observa el efecto de separar manualmente los neutrones con $\mu = 1$	24
4.9. Distribuciones de x vs y para el <i>trackfile</i> remuestreado utilizando bordes manuales para separar el canal de vacío explicitamente.	25

4.10. Comparación de la distribución de letargia entre el trackfile original y el trackfile remuestreado.	27
4.11. Comparación de la distribución de μ entre el trackfile original y el trackfile remuestreado.	27
4.12. Distribuciones de x vs y para el <i>trackfile</i> remuestreado.	28

Índice de tablas

4.1.	Divergencia KL parcial y total para la configuración Equal / Equal . . .	22
4.2.	Divergencia KL parcial y total para la configuración Equal / Equal . . .	26
4.3.	Divergencia KL parcial y total para la configuración Equal / Equal . . .	28

Resumen

Este es el resumen en castellano.

La tesis debe reflejar el trabajo desarrollado, mostrando la metodología utilizada, los resultados obtenidos y las conclusiones que pueden inferirse de dichos resultados.

Palabras clave: FORMATO DE TESIS, LINEAMIENTOS DE ESCRITURA, INS-TITUTO BALSEIRO

Abstract

This is the title in English:

The thesis must reflect the work of the student, including the chosen methodology, the results and the conclusions that those results allow us to draw.

Keywords: THESIS FORMAT, TEMPLATES, INSTITUTO BALSEIRO

Capítulo 1

Introducción

1.1. Contexto y motivación

Las simulaciones Monte Carlo son la herramienta estándar cuando la complejidad geométrica o la marcada anisotropía angular del flujo neutrónico hacen inviables los métodos determinísticos. Sin embargo, cuando las partículas atraviesan blindajes o regiones altamente absorbentes¹, la estadística disponible en la zona de interés se reduce considerablemente, aumentando significativamente la incertidumbre en tallies clave como el flujo escalar o la dosis equivalente ambiental. La incertidumbre estadística de estos resultados, por lo general, decrece lentamente con el número de historias simuladas, incrementando el costo computacional de forma prohibitiva.

Para mitigar esta problemática, se emplean técnicas de reducción de varianza. Entre ellas, destaca el método general del *source biasing*, basado en re-muestrear las fuentes originales. Esta técnica consiste en reemplazar la distribución original de partículas por una estadísticamente equivalente, construida sobre una superficie intermedia estratégicamente seleccionada. De esta manera, las partículas transportadas tienen mayor probabilidad de contribuir eficientemente a los tallies seleccionados, mejorando la estadística en la región objetivo sin aumentar desproporcionadamente el tiempo de CPU.

1.2. Fuentes distribucionales – base conceptual

El método se implementa dividiendo el problema original en una sucesión de etapas consecutivas delimitadas por *superficies de acople* $\{\mathcal{S}_i\}_{i=1}^{n-1}$. Durante cada etapa i , se simulan partículas desde la fuente original hasta la superficie \mathcal{S}_i , almacenándose las propiedades de cada partícula (*tracks*) en el espacio de fases ($\mathbf{E}-\mathbf{r}-\boldsymbol{\Omega}$) y su peso estadístico. Estas superficies se definen en posiciones donde sea posible registrar suficientes partículas para construir una fuente secundaria representativa en un tiempo razonable.

¹Deep penetration problem

A partir de las listas generadas, se estima la distribución multidimensional de las partículas en la superficie S_i , preservando las correlaciones entre las variables mencionadas. Esta distribución estimada se utiliza luego como fuente inicial en la siguiente etapa ($i + 1$). De este modo, la fuente se traslada progresivamente hacia la región objetivo, logrando la precisión requerida con un número considerablemente menor de historias que el método tradicional sin reducción de varianza.

En resumen, el procedimiento consta de tres etapas fundamentales:

- **Detección:** Registro de los tracks en superficies intermedias de desacople que separan las etapas de simulación. En este proceso se obtiene un *trackfile* original al cual se lo va a procesar con la metodología desarrollada en este trabajo.
- **Estimación:** Aproximación de la distribución multidimensional y sus correlaciones, a partir del *trackfile*.
- **Producción:** Remuestreo de la distribución estimada para generar nuevas partículas en simulaciones subsecuentes.

Los desarrollos previos en el Departamento de Física de Reactores y Radiaciones (DFRyR) han empleado histogramas anidados con discretización gruesa y fina (macro/micro-bins) para capturar adecuadamente las correlaciones entre energía, posición y dirección en fuentes planas rectangulares. Si bien este enfoque permitió resolver satisfactoriamente casos específicos relacionados con el reactor RA-10, presenta limitaciones. Entre ellas, destacan la necesidad de definir manualmente las grillas de discretización, la poca suavidad inherente a los histogramas y las dificultades para tratar correctamente discontinuidades marcadas, como aquellas generadas por cambios abruptos de material o geometría.

Posteriormente, la herramienta KDSource—desarrollada también en el DFRyR—introdujo el uso de técnicas más avanzadas basadas en *Kernel Density Estimation* (KDE) multivariante adaptativa. El flujo de trabajo de KDSource comprende dos etapas diferenciadas: (i) una fase inicial de optimización *off-line*, en la cual se ajusta automáticamente el modelo KDE a partir de listas de tracks preexistentes, y (ii) una fase de muestreo *on-the-fly*, donde un módulo integrado en C/C++ genera nuevas partículas durante la simulación Monte Carlo manteniendo las correlaciones globales y la normalización del peso original. Este enfoque elimina la necesidad de manejar listas voluminosas de tracks durante la simulación, optimizando sustancialmente el uso de memoria RAM.

No obstante, KDE presenta una desventaja notable: su carácter inherentemente suavizante puede reducir la capacidad de representar adecuadamente discontinuidades abruptas presentes en ciertos problemas físicos relevantes. En consecuencia, el presente trabajo propone desarrollar un esquema complementario basado en histogramas

multidimensionales adaptativos. El objetivo es mantener las ventajas del remuestreo continuo ofrecido por KDE, pero proporcionando un control más explícito sobre la resolución local y permitiendo capturar discontinuidades importantes.

1.3. Aportes específicos de este trabajo

Este trabajo busca profundizar el desarrollo de KDSource mediante la incorporación de histogramas multidimensionales adaptativos como una alternativa -o complemento- a la metodología KDE existente. Las contribuciones específicas son:

- Implementación de histogramas multidimensionales adaptativos en KDSource, capaces de:
 - preservar las correlaciones **esenciales** entre variables ($\mathbf{E}-\mathbf{r}-\Omega$) para fuentes planas rectangulares perpendiculares al eje z ;
 - representar fielmente discontinuidades espectrales y espaciales debidas a interfaces abruptas o colimadores;
 - ofrecer un control explícito de la resolución en la aproximación de las distribuciones y correlaciones.
- Integración optimizada del flujo de trabajo en **OpenMC** mediante:
 - generación *off-line* de un archivo intermedio en formato XML **conteniendo** histogramas adaptativos y metadatos de la fuente;
 - desarrollo de un módulo en C que utilice eficientemente esta información para producir partículas individualmente;
 - implementación de un **muestreo** *on-the-fly* integrado directamente en OpenMC, minimizando la ocupación de memoria al evitar la carga y gestión de archivos extensos de partículas.
- Validación **sistemática** del método en casos de complejidad creciente:
 - Verificación de la técnica de resampling utilizando *trackfiles* de ejemplo.
 - Un caso simplificado, consistente en un haz colimado ingresando en un paralelepípedo de agua atravesado por un canal de vacío, con fuentes definidas artificialmente para permitir una comparación con una simulación directa sin **reducción de varianza**.
 - Un caso más realista condicionado por la fuente original: la propagación a través del conducto N.^o 5 del reactor RA-6, utilizando una trackfile proporcionada por el departamento de Física de Neutrones generada a través de

una simulación del núcleo en OpenMC, lo cual impone restricciones estadísticas reales para evaluar el desempeño práctico del método propuesto.

Capítulo 2

Herramientas adicionales

Este capítulo tiene por objetivo presentar y describir las herramientas computacionales y teóricas **fundamentales** utilizadas a lo largo de este trabajo. Específicamente, se abordarán los programas OpenMC y KDSource, las técnicas estadísticas empleadas (como la divergencia KL), los formatos de archivos usados (MCPL y XML), y los lenguajes de programación involucrados (Python, C y C++).

2.1. OpenMC

OpenMC es un programa de simulación Monte Carlo desarrollado inicialmente en el Massachusetts Institute of Technology (MIT) como software *open-source*. Actualmente es mantenido por una activa comunidad internacional que contribuye continuamente a su desarrollo y expansión. Está especialmente orientado al cálculo del transporte de neutrones y fotones, permitiendo tanto simulaciones de criticidad como simulaciones de fuente fija. En este trabajo se emplean exclusivamente simulaciones de fuente fija.

Una de las ventajas de OpenMC es su flexibilidad en la obtención de resultados (*tallies*). El código permite registrar diferentes magnitudes físicas como flujos, dosis, corrientes y espectros energéticos, además de ofrecer la posibilidad de registrar partículas que atraviesan superficies específicas mediante archivos denominados **trackfiles**. Estos archivos almacenan información **detallada** de las partículas, permitiendo su posterior análisis o reutilización para generar nuevas simulaciones. Asimismo, OpenMC incorpora técnicas avanzadas de reducción de varianza, como las ventanas de peso (*weight windows*), que resultan fundamentales para reducir la incertidumbre estadística de los resultados en áreas de interés específico, técnica **particularmente** utilizada en este trabajo.

2.2. KDSource

KDSource es una herramienta computacional desarrollada en el Departamento de Física de Reactores y Radiaciones del Instituto Balseiro, cuyo objetivo principal es procesar *trackfiles* generados en simulaciones Monte Carlo para la construcción de nuevas fuentes distribucionales de radiación. Su integración con OpenMC permite desacoplar geométricamente simulaciones complejas, facilitando significativamente el cálculo de transporte en geometrías difíciles o extensas.

El fundamento original de KDSource reside en la técnica **Kernel Density Estimation (KDE)**, una técnica estadística que permite estimar distribuciones continuas de variables a partir de muestras discretas, manteniendo la correlación existente entre ellas. En este trabajo, se propone y desarrolla una alternativa al método KDE, utilizando histogramas multidimensionales adaptativos. Este método tiene como ventajas principales un mayor control explícito sobre la resolución local y la capacidad mejorada para capturar discontinuidades abruptas presentes en el espacio de fases.

KDSource permite, además, llenar "huecos en el espacio de fases que aparecen debido a limitaciones estadísticas inherentes a los *trackfiles*, lo que evita sesgos en las simulaciones posteriores y asegura una representación más completa y precisa de las distribuciones originales.

2.3. Divergencia de Kullback-Leibler (KL)

La divergencia KL es una métrica utilizada ampliamente en estadística y teoría de la información para cuantificar la distancia entre dos distribuciones de probabilidad. En este trabajo, la divergencia KL es empleada como métrica cuantitativa para evaluar la precisión del método implementado. Específicamente, se compara la similitud entre diferentes fuentes generadas a partir del mismo archivo de *tracks*, permitiendo medir objetivamente el desempeño de los métodos desarrollados en términos de su capacidad para preservar correctamente las características estadísticas originales de la distribución.

2.4. Formato MCPL

El formato **MCPL (Monte Carlo Particle List)** es un estándar desarrollado con el propósito de permitir el intercambio eficiente de información entre distintos códigos de simulación Monte Carlo. Este formato permite almacenar listas de partículas de forma eficiente y compacta, conteniendo información detallada sobre energía, posición, dirección y peso estadístico de cada partícula registrada. Su utilización en este

el proyecto facilita la transferencia de información entre OpenMC, KDSource, y potencialmente otros códigos de simulación, simplificando **significativamente** la cadena de cálculos involucrados.

2.5. Formato XML

El formato **XML (Extensible Markup Language)** es un lenguaje utilizado para describir y almacenar información estructurada de manera jerárquica, basándose en una organización de datos tipo árbol. Debido a esta característica, es particularmente adecuado para guardar las distribuciones estimadas mediante histogramas multidimensionales adaptativos, método central en este trabajo. OpenMC utiliza archivos XML para almacenar la configuración completa de sus simulaciones (geometría, materiales, configuración de *tallies*, etc.), por lo que la elección de este formato facilita la integración entre los componentes desarrollados.

2.6. Lenguajes de programación: Python, C y C++

A lo largo del desarrollo del proyecto, se utilizaron principalmente tres lenguajes de programación:

- **Python:** Un lenguaje de alto nivel especialmente adecuado para interfaces de usuario, análisis exploratorio de datos y configuración de simulaciones debido a su simplicidad, claridad y flexibilidad. KDSource hace uso **extensivo** de Python para la preparación y procesamiento de datos previos al muestreo Monte Carlo.
- **C:** Un lenguaje de programación de bajo nivel conocido por su eficiencia computacional, velocidad y control preciso sobre la gestión de memoria. Se utilizó en este trabajo para desarrollar módulos específicos encargados del muestreo eficiente de partículas, especialmente cuando se requieren grandes volúmenes de datos o **simulaciones intensivas computacionalmente**.
- **C++:** OpenMC está íntegramente implementado en C++, combinando la eficiencia de lenguajes de bajo nivel con capacidades avanzadas de abstracción y organización orientada a objetos, facilitando la integración, mantenimiento y expansión de funcionalidades del código.

La combinación efectiva de estos lenguajes permitió optimizar el desempeño computacional global de la cadena de simulación desarrollada, manteniendo a la vez la claridad y facilidad de uso.

Capítulo 3

Metodología para la Generación de Fuentes Monte Carlo Mediante Histogramas Multidimensionales

3.1. Introducción general al método

La metodología propuesta se basa en la utilización de *trackfiles* generados en simulaciones Monte Carlo previas, específicamente usando OpenMC, para definir fuentes en simulaciones subsiguientes. Esta técnica se enmarca dentro de los métodos de reducción de varianza conocidos como *Source Biasing*.

3.2. Definición del espacio de fases (E – \mathbf{r} – Ω)

Para aproximar correctamente el espacio de fases se consideraron seis variables para representar la energía, posición y dirección: tres coordenadas espaciales (x, y, z), dos variables direccionales definidas en coordenadas esféricas ($\mu = \cos(\theta), \phi$) y una variable energética (E o letargia, definida como una transformación logarítmica de la energía). En situaciones específicas, tales como la utilizada en esta tesis donde se registra la fuente en una superficie perpendicular al eje z , se reduce a cinco variables, ya que la coordenada z permanece constante.

Figura: Diagrama de coordenadas esféricas mostrando cómo se definen las variables direccionales μ y ϕ .

3.3. Procesamiento del *trackfile* original

Inicialmente, las partículas provenientes de la simulación Monte Carlo original se filtran seleccionando únicamente aquellas que se propagan hacia la región de interés y

se separan las variables relevantes mencionadas, además del peso estadístico (*weight*).

Figura: Tabla o esquema ilustrando la estructura de la lista de partículas (*letargia*, *x*, *y*, μ , ϕ , *weight*), indicando que contiene cientos de miles de entradas.

3.4. Aproximación de distribuciones mediante histogramas

Las distribuciones continuas de las variables en el espacio de fases pueden representarse, de forma general, mediante histogramas. La elección del método de discretización (bineado) es crucial y condiciona la calidad de la aproximación obtenida. Los tres esquemas de bineado utilizados en este trabajo son:

- **bineado de igual separación:** Divide el rango completo de la variable en intervalos de ancho constante.
- **bineado de igual integral:** Divide el rango en intervalos que contienen aproximadamente la misma cantidad de peso estadístico, generando así bins de tamaño variable. Este método logra una representación más eficiente en términos estadísticos, especialmente en regiones donde la densidad cambia abruptamente.
- **bineado adaptativo:** Divide el rango utilizando una discretización iterativa que asigna mayor resolución a las zonas de alta densidad estadística y menor resolución en regiones escasamente pobladas, con el objetivo explícito de reducir el ruido estadístico manteniendo resolución en los cambios abruptos de la distribución.

En este trabajo se profundiza particularmente sobre el método de bineado adaptativo. El procedimiento adaptativo propuesto se realiza en dos etapas principales:

1. **Aproximación inicial gruesa:** Se discretiza la distribución con una cantidad reducida de bins uniformemente distribuidos, típicamente utilizando cerca del 25 % del número final previsto de bins.
2. **Refinamiento iterativo:** En cada iteración se evalúa la diferencia absoluta entre la distribución acumulada estimada (CDF aproximada mediante los bins actuales) y la distribución acumulada de referencia (calculada con muchos bins). Se agregan bins adicionales precisamente en las regiones donde esta diferencia es máxima, mejorando progresivamente la calidad del histograma resultante.

Esta estrategia adaptativa permite capturar adecuadamente las regiones críticas de la distribución, proporcionando un balance controlado entre resolución local y suavidad global.

Figura: Esquema gráfico del procedimiento de *bining* adaptativo, mostrando claramente las distribuciones estimadas con pocos bines, la distribución real y la diferencia absoluta utilizada para definir nuevos bines.

3.5. Mantenimiento de correlaciones mediante macrogrupos

El algoritmo desarrollado permite preservar las correlaciones entre variables del espacio de fases a través de divisiones sucesivas del conjunto de datos. Este proceso admite tres esquemas posibles de bineado para cada variable: de igual separación, de igual integral o adaptativo. En todos los casos, la variable considerada se utiliza para dividir el conjunto de partículas actual en subgrupos o *macrogrupos*, que son luego tratados recursivamente.

Particularmente, en el caso del binning adaptativo, el procedimiento comienza con una partición inicial de baja resolución —usualmente cuatro macrogrupos— y se aplica un refinamiento iterativo utilizando un criterio similar al empleado en la sección anterior: se identifican las regiones donde la separación entre la distribución acumulada empírica y la distribución acumulada de referencia es mayor, y se subdividen esas regiones para aumentar la resolución local.

Este proceso de partición se aplica a cada variable en un orden definido por el usuario, generando una estructura en forma de árbol. En cada nodo del árbol se almacena la distribución acumulada de la variable correspondiente a ese nivel, junto con las fronteras de los macrogrupos definidos. Esta estructura permite preservar las correlaciones multidimensionales entre variables, ya que cada división se realiza condicionada a las divisiones previas.

Figura: Esquema ilustrando la estructura jerárquica de macrogrupos y microgrupos formando un árbol, resaltando claramente la jerarquía de variables.

3.6. Implementación computacional

La metodología descrita ha sido implementada en Python, debido a su leve/moderado costo computacional, creando una rutina que permite configurar parámetros tales como el número de macrogrupos, microgrupos, estilo de bineado de macrogrupos y microgrupos y orden de procesamiento de las variables. Esta rutina también ofrece la opción de insertar bordes manuales de macrogrupos cuando se dispone de información previa que optimice la estimación.

La estructura generada (árbol jerárquico de histogramas multidimensionales) es almacenada en un archivo XML, formato ideal debido a la estructura tipo árbol del

dato generado. Posteriormente, esta información es utilizada directamente como fuente en simulaciones Monte Carlo subsecuentes en OpenMC, mediante modificaciones específicas realizadas tanto en su API de Python como en su código fuente en C++.

3.7. Remuestreo de partículas en simulaciones Monte Carlo subsecuentes

El proceso de generación de partículas a partir de la distribución guardada implica:

1. Generar un número pseudoaleatorio entre 0 y 1.
2. Interpolar dicho número en la distribución acumulada normalizada de la variable raíz del árbol.
3. Avanzar secuencialmente por las ramas del árbol determinando valores de las variables subsecuentes hasta obtener un conjunto completo de variables del espacio de fases.

Este enfoque evita la necesidad de cargar grandes listas en memoria RAM durante la ejecución de simulaciones Monte Carlo, lo que simplifica considerablemente el manejo de fuentes en OpenMC.

Este enfoque permite generar partículas para una siguiente simulación Monte Carlo. Existen dos formas de integrar esta funcionalidad con OpenMC:

- Una opción consiste en realizar, de forma *off-line*, el muestreo de una cantidad predeterminada de partículas y guardar sus propiedades en un archivo tipo track-file. Este archivo puede ser luego utilizado por OpenMC mediante su opción de simulación desde lista de partículas preexistente.
- Alternativamente, se puede ejecutar OpenMC con una fuente del tipo `HistogramSource`, definida ad hoc y configurada mediante un archivo XML. En este caso, OpenMC accede directamente al árbol de histogramas durante la simulación y genera cada partícula *on-the-fly*, lo que reduce significativamente el uso de memoria y evita la necesidad de almacenar archivos intermedios voluminosos.

3.8. Conexión con la implementación computacional

La metodología expuesta será implementada mediante códigos desarrollados en Python, C y C++, integrados específicamente dentro de los entornos de simulación

Monte Carlo OpenMC y KDSource. La implementación detallada y comentada de estos códigos se presenta en el Anexo A, mostrando de forma explícita cómo se lleva a la práctica el proceso descrito anteriormente.

En los capítulos siguientes el desempeño del método descrito será evaluado para cuantificar el grado en que el método conserva las propiedades originales del conjunto de partículas registrado.

Capítulo 4

Aplicación: Canal de vacío rodeado por Agua

En este capítulo se presenta una aplicación del método desarrollado para la generación de fuentes Monte Carlo mediante histogramas multidimensionales. El caso de estudio seleccionado consiste en un canal de vacío rodeado lateralmente por un bloque de agua liviana, simulando de forma aproximada una guía de neutrones. El objetivo del análisis es evaluar el desempeño del método propuesto en la generación de fuentes intermedias, con el fin de mejorar la estadística del flujo escalar en regiones específicas del modelo. (y conservar la corriente.)

Para ello, se realizaron varias etapas de simulación. Inicialmente, se efectuó una simulación para registrar un archivo de partículas (trackfile) en una superficie intermedia. Posteriormente, se llevó a cabo una simulación más extensa desde la entrada del sistema hasta otra superficie más alejada, con el propósito de obtener con precisión la distribución del flujo escalar a lo largo del canal, así como la corriente y el espectro neutrónico incidente sobre esta superficie final.

Finalmente, se procesó el trackfile grabado en la superficie intermedia para construir una fuente basada en histogramas multidimensionales. Esta fuente se utilizó en una tercera simulación iniciada directamente desde la posición intermedia, obteniendo así una estadística suficientemente convergida hasta la superficie más alejada. Esta última simulación permitió realizar una comparación directa con los resultados obtenidos en la simulación extensa desde la entrada, evaluando así la eficacia y precisión del método de generación de fuentes implementado.

4.1. Descripción del modelo simulado en OpenMC

El modelo utilizado en las simulaciones consiste en un canal interno de vacío rodeado lateralmente por un bloque de agua liviana. El sistema se diseñó como un paralelepípedo

de agua con dimensiones $15\text{ cm} \times 15\text{ cm} \times 100\text{ cm}$, que alberga en su interior un canal de vacío con sección transversal cuadrada de $3\text{ cm} \times 3\text{ cm}$, orientado en dirección del eje z .

La fuente de neutrones utilizada se definió sobre la cara de entrada del sistema (ubicada en $z = 0, \text{ cm}$) y consistió en neutrones monoenergéticos con energía de $E = 1 \text{ MeV}$ y colimados en dirección del eje z (con coseno direccional $\mu = \cos(\theta) = 1$). Esta configuración genera dos poblaciones de neutrones claramente diferenciadas: la primera, formada por neutrones que atraviesan el canal de vacío sin colisiones y mantienen tanto su energía inicial como su dirección; y la segunda, constituida por neutrones que interactúan con el moderador de agua, sufriendo dispersión angular y pérdida energética.

Para el análisis y posterior generación de la fuente, se registró un *trackfile* sobre una superficie intermedia situada en $z = 15 \text{ cm}$. Este archivo contiene información sobre ambas poblaciones mencionadas, es decir, neutrones no colisionados y neutrones dispersados.

Durante las simulaciones se emplearon tallies para determinar el flujo escalar neutrónico a lo largo del canal, tanto dentro del canal de vacío como en el moderador circundante.

Para optimizar la estadística en regiones con baja presencia de partículas, particularmente en el agua, se implementó la técnica de ventanas de peso adaptativo disponible en OpenMC. Este método actualiza dinámicamente los pesos de las partículas durante la simulación, permitiendo obtener mejores estadísticas con partículas de peso estadístico reducido.

4.2. Procesamiento del *trackfile*

4.2.1. Metodología del análisis

La estrategia general consiste en aplicar el método al *trackfile* registrado, utilizando distintos esquemas de configuración. En cada configuración se varían los parámetros: el tipo de bineado, el número de macrogrupos y microgrupos, y la posibilidad de indicar bordes de macrogrupo manualmente, y se analiza su impacto en la calidad de la reconstrucción. Para definir manualmente los bordes de los macrogrupos es necesario obtener información previa sobre la geometría o el comportamiento de las partículas que permita mejorar la separación de poblaciones con características distintas.

Los principales aspectos del análisis son:

- **Bineado uniforme vs. adaptativo:** se comparan histogramas de igual ancho y adaptativos. A su vez, para mejorar la representación del espacio de fase $\mathbf{E}-\mathbf{r}-\Omega$,

se analiza el efecto de incorporar bordes de macrogrupos definidos manualmente al caso de bineado uniforme. Esto permite ajustar la segmentación de los macrogrupos a la geometría del sistema o al comportamiento esperado de las partículas, mejorando la separación entre poblaciones y, por ende, la calidad del remuestreo.

- **Cantidad de macrogrupos:** se comparan esquemas uniformes (por ejemplo, [8, 8, 8, 8], [6, 6, 6, 6]) y esquemas crecientes o decrecientes (como [9, 8, 7, 6], [6, 7, 8, 9]). Esta elección impacta en la capacidad de representar correlaciones sin introducir exceso de ruido estadístico.
- **Cantidad de microgrupos:** se estudia el efecto de aumentar o disminuir la resolución dentro de cada macrogrupo.

Para cada configuración de entrada se comparan visualmente las distribuciones 1D y 2D obtenidas, analizando las distribuciones y sus errores relativos, como así también se analiza la divergencia KL obtenida para los casos 1D y 2D.

- **Distribuciones 1D:** se comparan las distribuciones de cada variable remuestreadas utilizando el método implementado contra las originales del *trackfile*.
- **Correlaciones 2D:** se representan visualmente mediante mapas de error relativo entre las matrices de correlación originales y las reconstruidas a través del remuestreo.
- **Métrica cuantitativa:** se utiliza la divergencia de Kullback-Leibler (KL) como estimador numérico de la diferencia entre las distribuciones, permitiendo comparar configuraciones de forma objetiva.

4.2.2. Descripción del trackfile

El *trackfile* analizado fue registrado en una primera simulación del tubo de vacío desde el comienzo de la geometría. Corresponde a partículas registradas en una superficie ubicada a 15cm del inicio de la geometría. La lista contiene tanto neutrones que atraviesan la sección del canal, como neutrones que viajan por el agua. Sin embargo, la mayor proporción de peso estadístico se encuentra dentro del tubo de vacío, lo cual se corrobora en la proyección $x-y$, donde se observa una distribución más intensa contenida en un cuadrado correspondiente a la sección del tubo. La figura 4.1 muestra la proyección de los neutrones en el plano $x-y$.

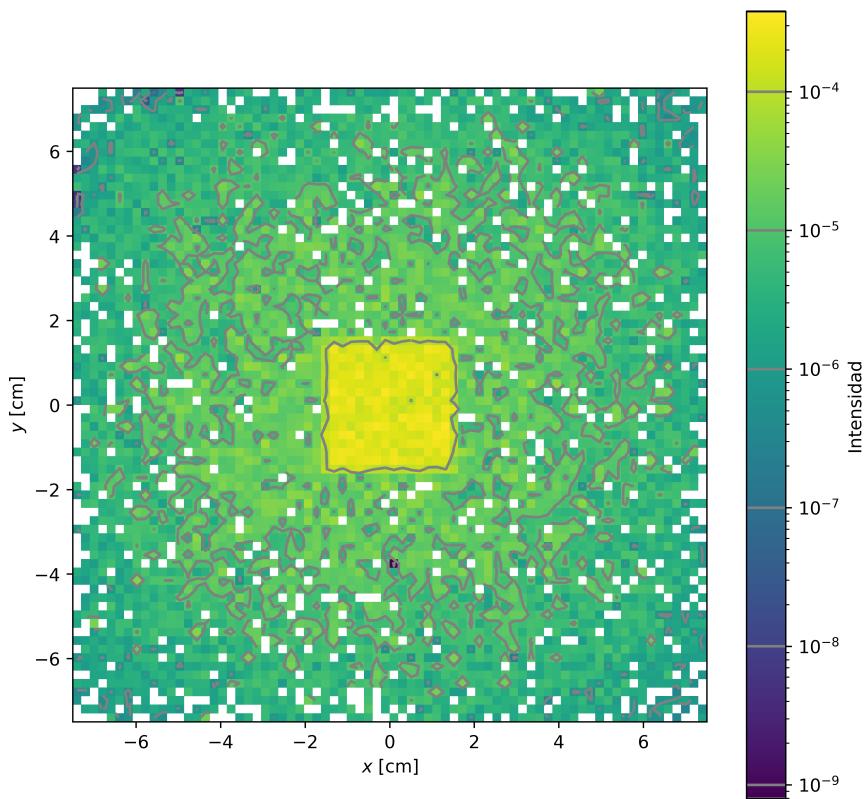


Figura 4.1: Distribuciones de x vs y para el *trackfile* registrado en la primera corrida del tubo de vacío.

Este conjunto contiene dos poblaciones de neutrones claramente diferenciadas. La primera corresponde a neutrones que no han sufrido colisiones: todos ellos poseen dirección $\mu = 1$ y una letargia mínima fija, sin dispersión alguna, lo cual indica que la fuente original fue configurada con estos valores de forma determinista. La segunda población incluye neutrones que han colisionado: en este caso, las distribuciones de μ y letargia son más amplias y continuas, reflejando la dispersión introducida por las interacciones. Este comportamiento se observa en la figura 4.2, donde se presentan las distribuciones de letargia y μ para el primer *trackfile*.

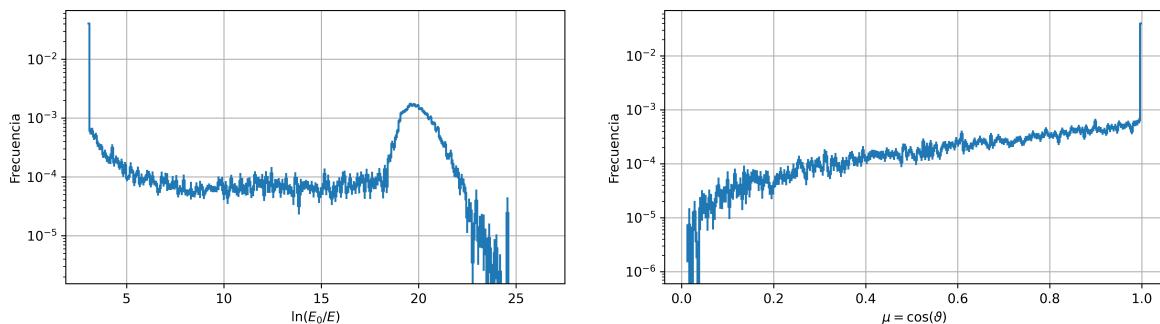


Figura 4.2: Distribuciones de letargia y μ para el *trackfile* registrado en la primera corrida del tubo de vacío, con escala logarítmica en el eje y. Se observa la presencia de dos poblaciones: una concentrada en $\mu = 1$ y letargia mínima, montada sobre una distribución continua de neutrones colisionados.

Esta doble estructura se evidencia particularmente en los gráficos 2D de letargia vs. μ , donde ambas poblaciones forman conjuntos visualmente separados (de hecho estamos hablando de dos conjuntos distintos. Repensar esto). Ver figura 4.3. Este fenómeno plantea un desafío para los métodos de muestreo, al requerir una representación precisa tanto de distribuciones concentradas tipo delta como de distribuciones extendidas y sus correlaciones.

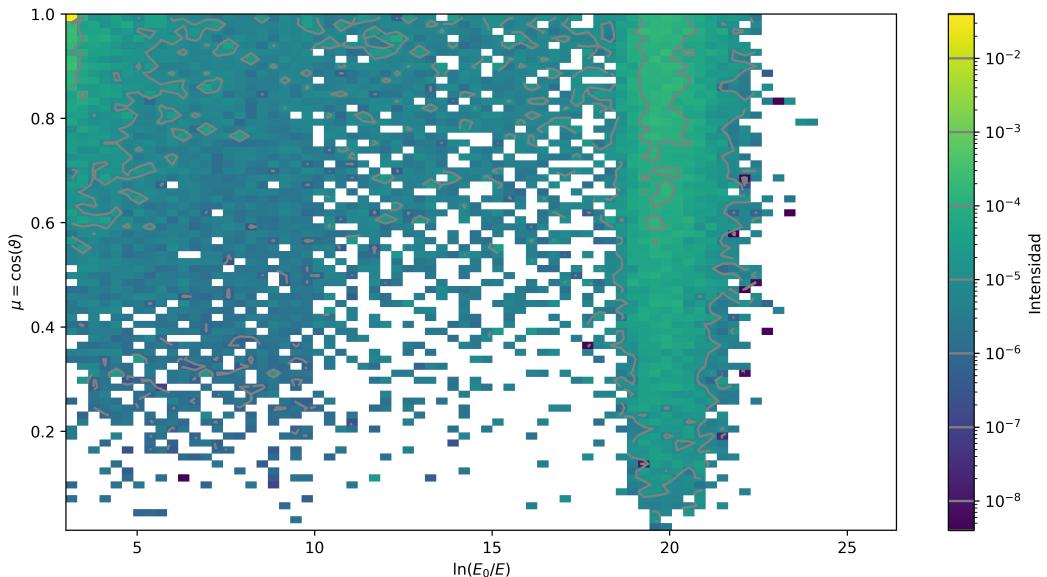


Figura 4.3: Distribuciones de letargia vs μ para el *trackfile* registrado en la primera corrida del tubo de vacío. Se observa la presencia de un conjunto de neutrones graficados como un pixel en $\mu = 1$ y letargia mínima, indicando la naturaleza discreta de la fuente original. A su vez se observa la presencia de un segundo conjunto de neutrones colisionados, que se distribuyen en el plano de forma continua, con un agrupamiento sobre letargia = 20, indicando la termalización de los neutrones.

A su vez se puede ver tanto en la figura 4.1 como en la figura 4.3 que aunque el bineado del plot 2D se haya hecho con 75 bins se observa claramente que existen muchos lugares del espacio de fase donde no hay neutrones. Esto es debido a que el trackfile original tiene un número limitado de neutrones. El objetivo de este método propuesto consiste en poder remuestrear el trackfile original para obtener un trackfile nuevo donde se pueda observar una mejor estadística en los lugares donde el trackfile original tiene pocos neutrones.

4.2.3. Bineado uniforme de microgrupos y macrogrupos

Se empleó una configuración con macrogrupos y microgrupos de ancho uniforme. Se seleccionaron $n_{macro} = 6$ y $n_{micro} = 50$ para cada variable, en el orden de variables: $[\ln(E_0/E), x, y, \mu, \phi]$. Esta configuración permite evaluar el desempeño base sin ningún tipo de adaptación.

Visualmente, se observa que la distribución tipo delta en letargia mínima y $\mu = 1$ es reemplazada por un rectángulo con el ancho del bin, perdiéndose el detalle de los picos originales. El efecto del resampleo mediante bins uniformes se puede ver en las figuras 4.4 y 4.5, donde se comparan las distribuciones de letargia y μ entre el trackfile original y el remuestreado.

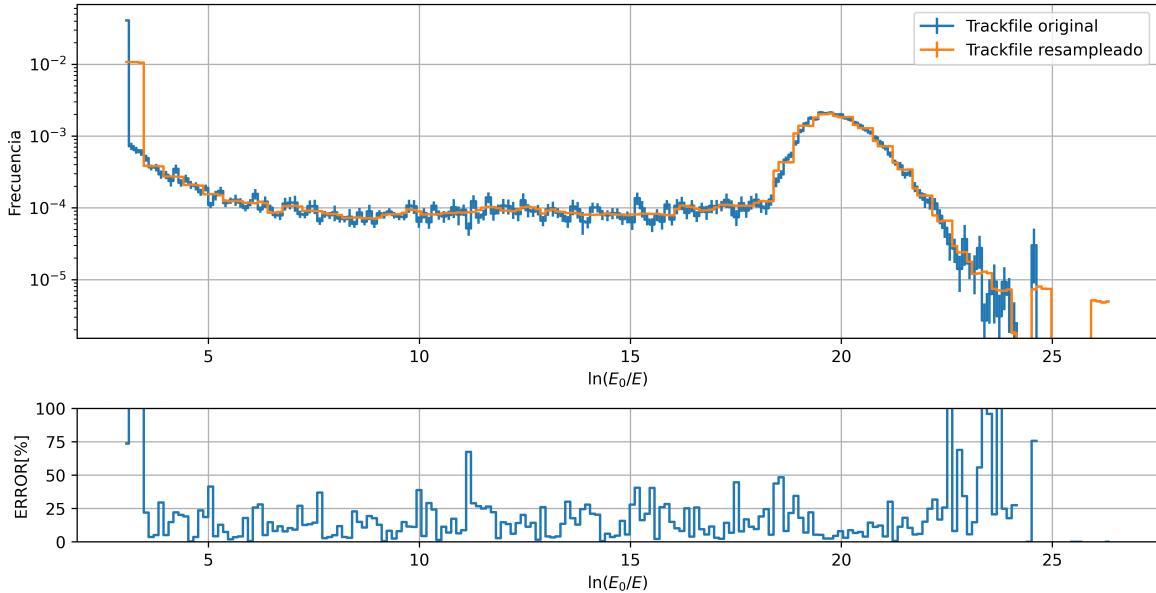


Figura 4.4: Comparación de la distribución de letargia entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de la discretización uniforme en la distribución de letargia.

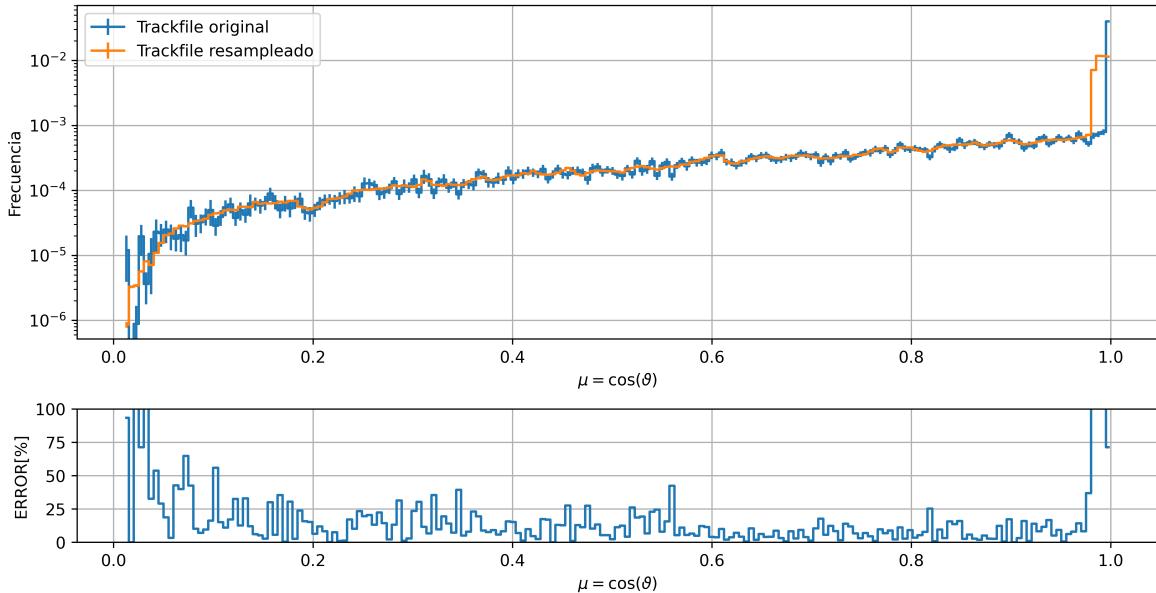


Figura 4.5: Comparación de la distribución de μ entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de la discretización uniforme en la distribución de μ .

Este efecto captado en las figuras 4.4 y 4.5 produce que los neutrones que originalmente viajaban por el vacío perfectamente colimados y monoenergeticos ahora se

descolimen y obtengan variacion en energia. Esto produce que los neutrones que viajaban cerca de la interfaz agua vacio ahora puedan ingresar al agua. Esto produce una perdida en la corriente por el vacio y una ganancia en la corriente por el agua.

Otro efecto que se observa es que la resolucion de los histogramas, al ser de bineado uniforme, no permite atribuir mas bins donde haya mas estadistica. Por lo tanto no se asignan mas bins a las deltas de mu y letargia, ni se asignan mas bins a la zona de termalizacion en la letargia.

Analizando el caso del ploteo 2D de x vs y se observa el efecto del bineado uniforme en los macrogrupos debido a que se observa que el resampling deforma la distribucion original. En la figura 4.1 se observa el canal de vacio y alrededor la estadistica del agua, de forma uniforme alrededor del canal. Sin embargo en la figura 4.6 se observa que se difumina parte de la estadistica del canal de vacio dentro del agua en forma de cruz. Esto se debe a que hay macrogrupos que intersectan el canal de vacio y el agua y produce que los neutrones que viajaban cerca de la interfaz agua vacio ahora puedan aparecer en el agua.

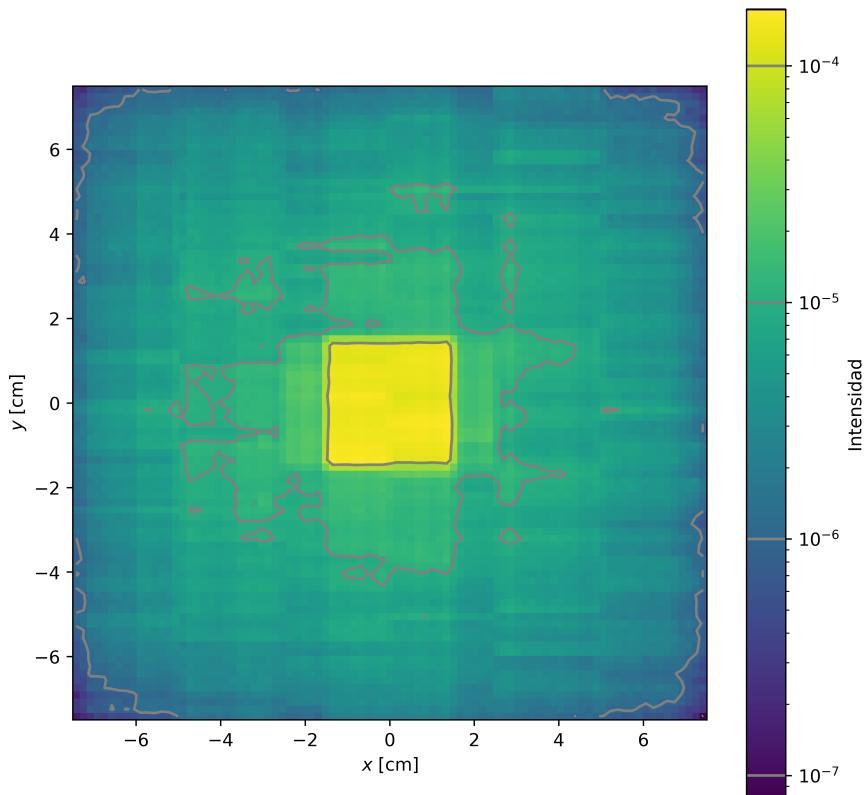


Figura 4.6: Distribuciones de x vs y para el *trackfile* remuestreado utilizando discretizacion uniforme tanto para macrogrupos como para microgrupos.

En la tabla 4.1 se presentan las divergencias KL 1D y 2D, tanto de forma parcial como total, para la configuración de bineado uniforme. Estos valores no indican informacion utilizable para decidir si el muestreo es aceptable o no. Sin embargo es util a

modo de comparacion contra otros bineados que posteriormente se van a mostrar.

Tabla 4.1: Divergencia KL parcial y total para la configuración Equal / Equal.

KL 1D		KL 2D	
Parámetro	Valor	Parámetros	Valor
$\ln(E_0/E)$	5.6517e-01	$\ln(E_0/E), x$	6.2119
x	4.8600e-01	$\ln(E_0/E), y$	6.2721
y	5.0204e-01	$\ln(E_0/E), \mu$	5.7268
μ	4.5200e-01	$\ln(E_0/E), \phi$	6.3791
ϕ	4.9704e-01	x, y	5.2382
		x, μ	4.7195
		x, ϕ	4.8746
		y, μ	4.7386
		y, ϕ	4.9020
		μ, ϕ	4.5841
Suma KL 1D 2.5023		Suma KL 2D 53.647	

4.2.4. Bineado uniforme de microgrupos y macrogrupos con bordes manuales

Para mitigar la pérdida de información debido a los problemas de resolucion del bineado uniforme, se incorporó la posibilidad de definir manualmente los bordes de los macrogrupos y microgrupos en las variables. Esto permitió aislar tanto la región correspondiente al canal de vacío, evitando que neutrones colimados se mezclen con partículas moderadas, como los neutrones de letargia mínima y $\mu = 1$.

Se definieron bordes manuales para las cuatro variables principales con el objetivo de aislar las regiones de mayor interés físico y evitar la mezcla entre poblaciones distintas. Los bordes se establecieron de la siguiente manera:

- **Letargia:** se fijó un borde en el valor mínimo de letargia + 1e-9 (correspondiente a los neutrones no colisionados) y el resto de los bordes se distribuyeron uniformemente en el rango restante.
- μ : se colocó un borde en $\mu = 1 - 1e - 9$ (dirección perfectamente colimada), separando así los neutrones no dispersados del resto; los demás bordes se ubicaron de forma uniforme en el intervalo restante.
- x e y : se asignaron bordes en las posiciones que delimitan el canal de vacío ($x = \pm 1,5 \text{ cm}$ y $y = \pm 1,5 \text{ cm}$), de modo que los macrogrupos coincidan con la geometría del canal y el agua circundante. El resto de los bordes se distribuyeron uniformemente fuera de esa región.

Esta segmentación permite preservar la física del sistema y mejorar la representación de las poblaciones diferenciadas en el proceso de remuestreo.

Al procesar el *trackfile* original con esta configuración, se observa que la distribución de letargia y μ se mantiene más cercana a la original, aunque aún se presenta un efecto debido a la falta de resolución donde hay más estadística. En la figura 4.7 se observa que la distribución remuestreada conserva la delta en letargia mínima. Sin embargo sería mejor obtener más bins en la zona de letargia mínima y en la zona de termalización. En la figura 4.8 se observa que la distribución remuestreada conserva la delta en $\mu = 1$. Sin embargo sería mejor obtener más bins en la zona de $\mu = 1$ y menos donde hay menos estadística.

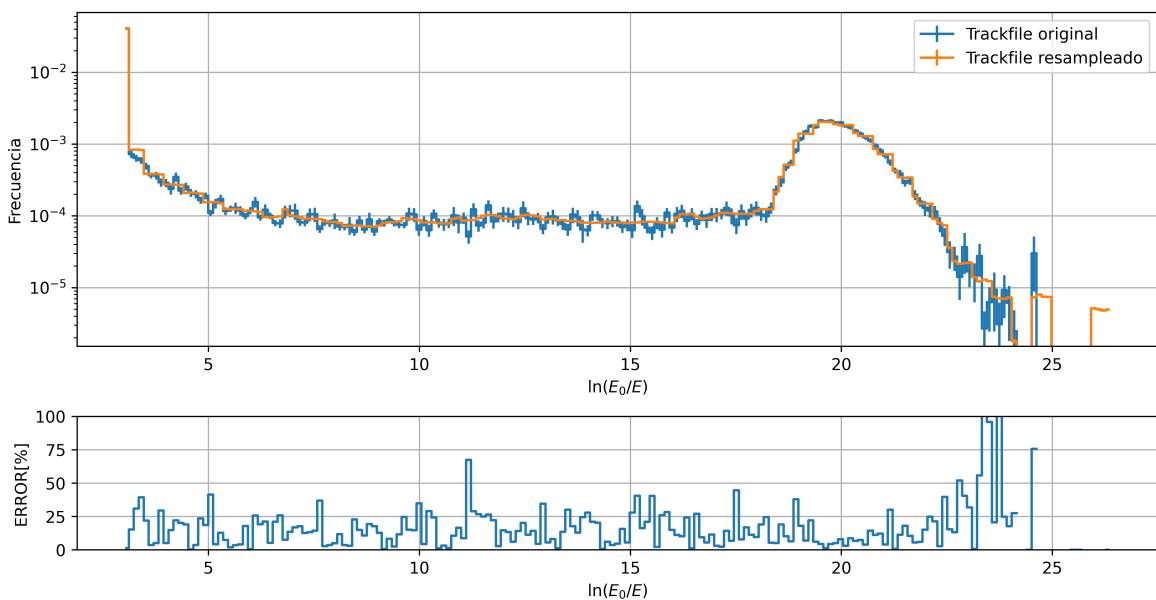


Figura 4.7: Comparación de la distribución de letargia entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de separar manualmente los neutrones con letargia mínima.

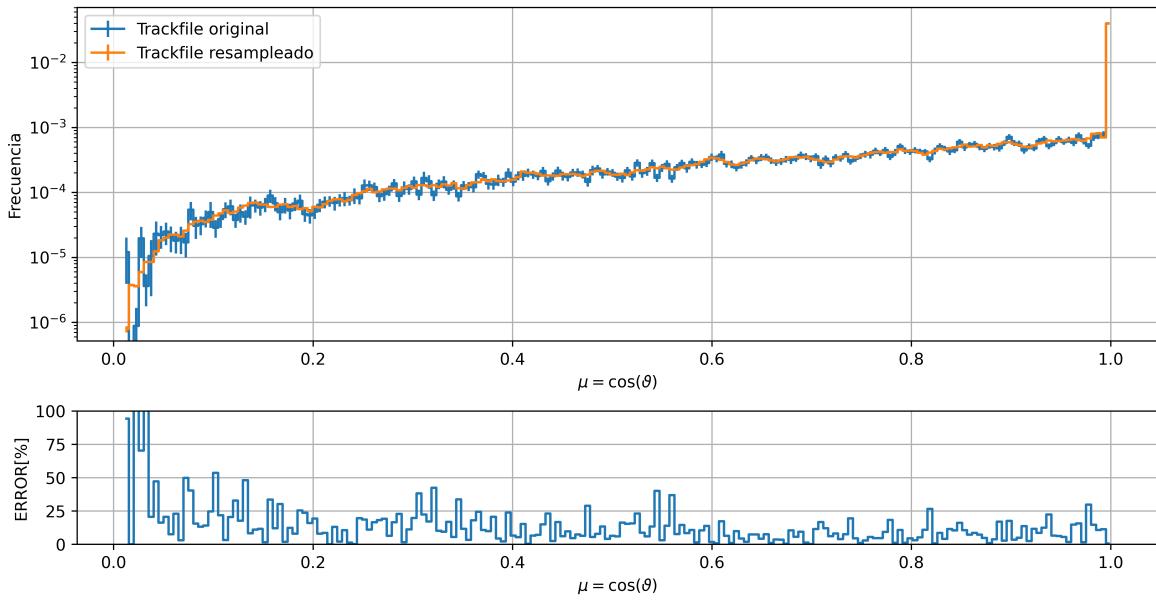


Figura 4.8: Comparación de la distribución de μ entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de separar manualmente los neutrones con $\mu = 1$.

A su vez en el grafico 2D de x vs y se observa que la distribucion del canal de vacio se mantiene mas concentrada y no se difumina en el agua. Sin embargo sigue habiendo una forma de cruz en el agua. Esto se sigue debiendo a la discretizacion uniforme de macrogupos. Para solucionar esto deberia haber mas macrogupos cerca de la interface y menos cerca del borde del modelo, acorde a la cantidad de estadistica presente en el *trackfile* original. En la figura 4.9 se observa la distribucion de x vs y para el *trackfile* remuestreado utilizando discretizacion uniforme tanto para macrogupos como para microgrupos, pero con bordes manuales.

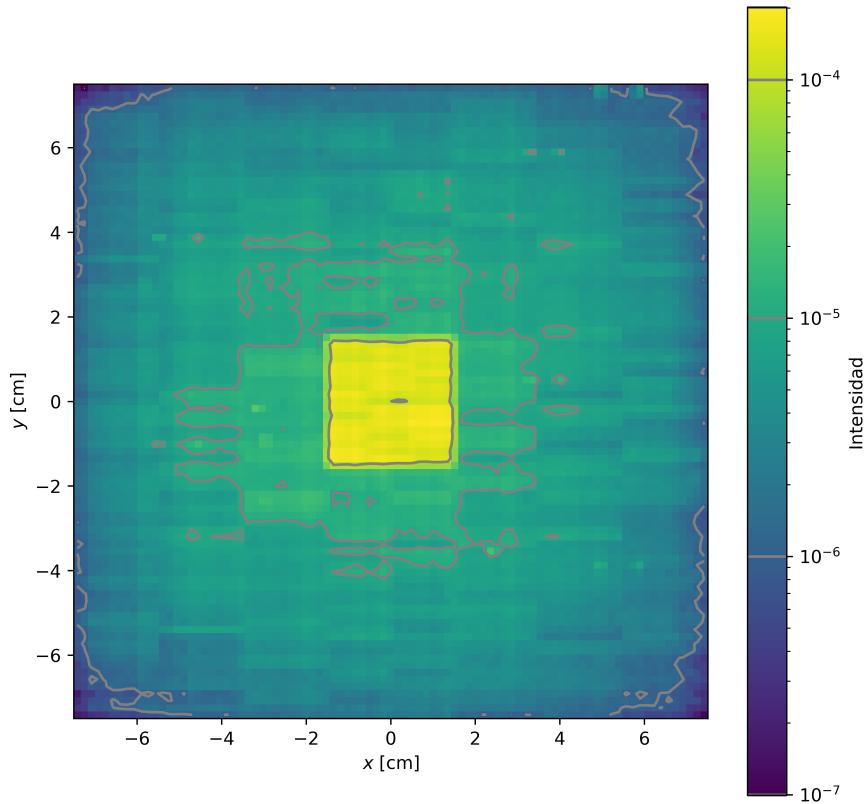


Figura 4.9: Distribuciones de x vs y para el *trackfile* remuestreado utilizando bordes manuales para separar el canal de vacío explicitamente.

En la tabla 4.2 se presentan las divergencias KL 1D y 2D, tanto de forma parcial como total, para la configuración de bineado uniforme con bordes manuales. Comparando estos valores contra los valores de la tabla 4.1 referidos a la configuración de bineado uniforme sin bordes manuales, se observa que la divergencia KL ha disminuido en todos los casos. Esto indica que la segmentación manual de los bordes de los macrogrupos ha permitido mejorar la representación de las distribuciones y correlaciones originales. Los valores mas destacados son los que contienen a la letargia y μ , debido a que concentraban la mayor estadística.

Tabla 4.2: Divergencia KL parcial y total para la configuración Equal / Equal.

KL 1D		KL 2D	
Parámetro	Valor	Parámetros	Valor
$\ln(E_0/E)$	4.6555e-01	$\ln(E_0/E), x$	4.7217
x	4.8674e-01	$\ln(E_0/E), y$	4.7441
y	5.0443e-01	$\ln(E_0/E), \mu$	4.2326
μ	3.8220e-01	$\ln(E_0/E), \phi$	4.3903
ϕ	3.9362e-01	x, y	5.2530
		x, μ	4.5925
		x, ϕ	4.7477
		y, μ	4.6143
		y, ϕ	4.7898
		μ, ϕ	4.2795
Suma KL 1D 2.2325		Suma KL 2D 46.366	

4.2.5. Bineado adaptativo de microgrupos y macrogrupos

Posteriormente se aplicó un esquema de histogramas adaptativos, donde la subdivisión de los macrogrupos fue determinada de forma automática en función de la densidad estadística. Esta técnica permitió una segmentación más eficiente, sin requerir intervención manual del usuario para indicar los cambios bruscos más representativos.

Para obtener una comparación representativa contra el caso de bineado uniforme, se utilizó la misma cantidad de macrogrupos y microgrupos que en la configuración anterior. En este caso, se emplearon $n_{macro} = 6$ y $n_{micro} = 50$ para cada variable, en el orden de variables: [$\ln(E_0/E)$, x , y , μ , ϕ].

Analizando la distribución remuestreada de letargia y μ podemos ver que se obtiene una densidad de bins mayor en las regiones donde hay mayor estadística. En la figura 4.10 se observa que la distribución remuestreada conserva la delta en letargia mínima y se le asignan más bins a la zona de letargia baja y termalización. A su vez se observa que se asignan relativamente pocos bins en donde hay pocos bins, provocando una mayor suavidad. En la figura 4.11 se observa que la distribución remuestreada conserva la delta en $\mu = 1$ y se le asignan más bins a la zona de $\mu = 1$. Sin embargo se observa que se reproduce el ruido estadístico debido a que hay un exceso de micro bins.

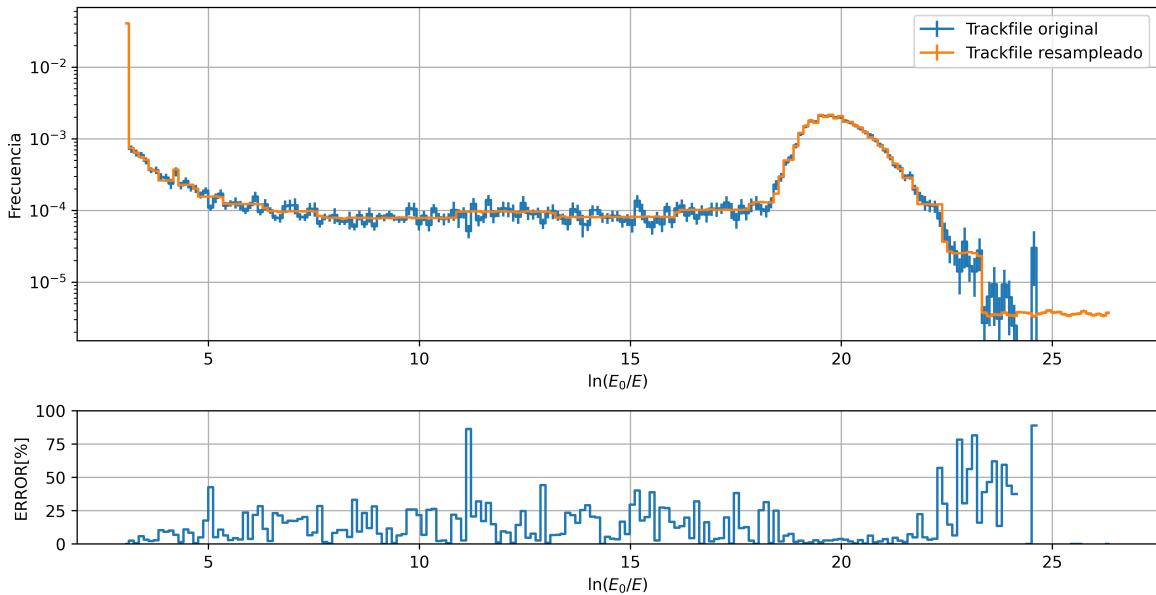


Figura 4.10: Comparación de la distribución de letargia entre el trackfile original y el trackfile remuestreado.

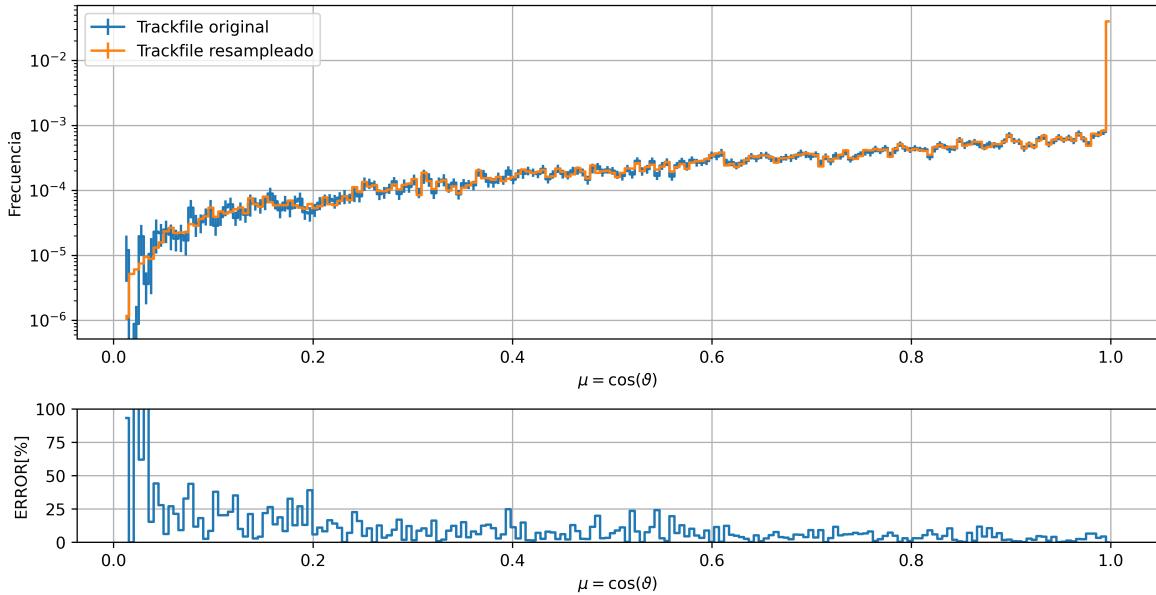


Figura 4.11: Comparación de la distribución de μ entre el trackfile original y el trackfile remuestreado.

Observando la distribución remuestreada de x vs y graficada en la figura 4.12 se observa que la distribución del canal de vacío se mantiene más concentrada y no se difumina en el agua. A su vez se observa que la distribución del agua se mantiene más difusa y no se observa la forma de cruz que se observaba en el caso de bineado uniforme. Esto es debido a que al ser un bineado adaptativo, los bins se asignan donde hay mayor estadística, evitando formar grupos de neutrones con poca estadística.

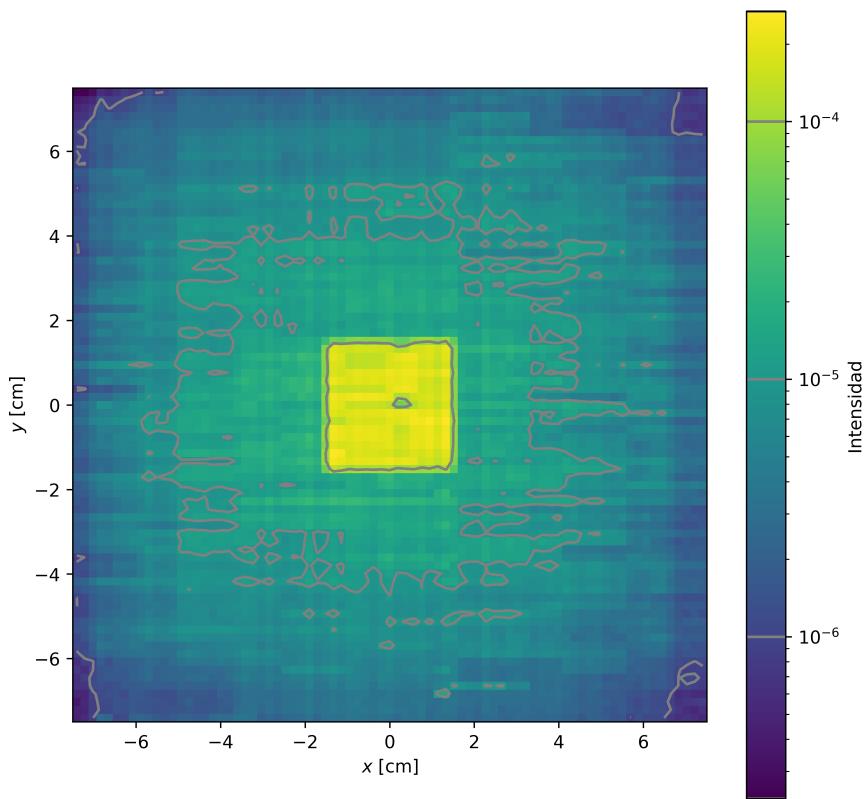


Figura 4.12: Distribuciones de x vs y para el *trackfile* remuestreado.

En la tabla 4.3 se presentan las divergencias KL 1D y 2D, tanto de forma parcial como total, para la configuración de bineado adaptativo. Comparando estos valores contra los valores de la tabla 4.2 referidos a la configuración de bineado uniforme con bordes manuales, se observa que se obtiene una metrica KL similar al caso de bineado uniforme con bordes manuales.

Tabla 4.3: Divergencia KL parcial y total para la configuración Equal / Equal.

KL 1D		KL 2D	
Parámetro	Valor	Parámetros	Valor
$\ln(E_0/E)$	4.6609e-01	$\ln(E_0/E), x$	4.7514
x	4.9211e-01	$\ln(E_0/E), y$	4.8433
y	5.1337e-01	$\ln(E_0/E), \mu$	4.2278
μ	3.8728e-01	$\ln(E_0/E), \phi$	4.7544
ϕ	3.9207e-01	x, y	5.4178
		x, μ	4.8211
		x, ϕ	5.2958
		y, μ	4.8074
		y, ϕ	5.2927
		μ, ϕ	4.6053
Suma KL 1D		Suma KL 2D	48.817

4.2.6. Bineado adaptativo de microgrupos y macrogrupos optimizado

Debido a que la sección anterior mostro que se obtiene una mejor utilización de los bins al utilizar un bineado adaptativo, se decidió seguir trabajando con este método y optimizar la cantidad de microgrupos y macrogrupos. Es posible aumentar la cantidad de macrogrupos y disminuir la cantidad de microgrupos, obteniendo una mejor representación de las correlaciones y una distribución de las variables más suavizada en las regiones de menor estadística. A su vez es posible utilizar una cantidad de macrogrupos y microgrupos distinta para cada variable.

Se utilizó la siguiente configuración de macrogrupos y microgrupos:

- **Macrogrupos:** se utilizó la configuración [6, 6, 6, 6, 6].
- **Microgrupos:** se utilizó la configuración [50, 50, 50, 50, 50].

4.3. Resultados de la simulación comparativa

4.3.1. Validación de tallies y aplicación de técnicas de reducción de varianza

Para validar los resultados se evaluaron distintas magnitudes físicas a lo largo del eje del sistema:

- Flujo escalar en secciones transversales: total, en agua, y en vacío.
- Espectro energético sobre una superficie de tally a $z = 80$ cm.
- Corriente en dirección z sobre planos intermedios.

Se aplicó reducción de varianza mediante weight windows generados con OpenMC, especialmente en regiones con moderación intensa, lo cual mejoró la estadística de tallies en el agua sin alterar el resultado global.

4.3.2. Síntesis y conclusiones

El caso del canal de vacío embebido en agua permitió poner en evidencia los desafíos que presentan las técnicas de muestreo cuando coexisten poblaciones de partículas con comportamientos disímiles. Se comprobó que:

- La segmentación espacial y direccional es crucial para preservar correlaciones en el muestreo.

- Los histogramas adaptativos constituyen una alternativa robusta y automática frente a configuraciones manuales.
- El método propuesto reproduce con alta fidelidad los resultados de flujo, espectro y corriente.

Este caso sirve como referencia para futuras aplicaciones en geometrías más complejas donde también existan discontinuidades materiales o comportamientos multimodales del campo de neutrones.

Capítulo 5

Validación Experimental: Conducto Número 5 del Reactor RA-6

- 5.1. Descripción del caso experimental del RA-6
- 5.2. Optimización del resampleo para la fuente experimental
- 5.3. Resultados de simulación en OpenMC y comparación experimental
 - 5.3.1. Distribución espacial del flujo en detectores
 - 5.3.2. Comparación ${}^3\text{He}$: simulación vs. experimento
- 5.4. Discusión sobre resultados y validación

Apéndice A

Implementación Computacional del Método

A.1. Código detallado en Python/C++

A.2. Pseudocódigo y comentarios

A.3. Archivos de configuración XML

A.4. Flujo de trabajo práctico

Bibliografía

Publicaciones asociadas

1. Mi primer aviso en la revista **ABC**, 1996
2. Mi segunda publicación en la revista **ABC**, 1997

Agradecimientos

A todos los que se lo merecen, por merecerlo

