

**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

4 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	2
2. Metodología para la Generación de Fuentes Monte Carlo Mediante Histogramas Multidimensionales	5
2.1. Introducción general al método	5
2.2. Definición del espacio de fases ($\mathbf{E-r-\Omega}$)	5
2.3. Procesamiento del <i>trackfile</i> original	5
2.4. Aproximación de distribuciones mediante histogramas	6
2.5. Mantenimiento de correlaciones mediante macrogrupos	6
2.6. Implementación computacional	7
2.7. Remuestreo de partículas en simulaciones Monte Carlo subsecuentes	7
2.8. Conexión con la implementación computacional	8
3. Evaluación del Método mediante Resampleo en <i>Trackfiles</i>	9
3.1. Metodología del análisis	9
3.2. Análisis del Trackfile 1: haz colimado en tubo de vacío	10
3.2.1. Configuración 1: bineado micro y macro uniforme	11
3.3. Resultados con Trackfile 1	13
3.3.1. Comparación entre esquema adaptativo y de ancho constante	14
3.4. Resultados con Trackfile 2	14
3.5. Resultados con Trackfile 3	15

4. Aplicación al Caso del Canal de Vacío en Agua	17
4.1. Descripción de la geometría y condiciones de frontera	17
4.2. Problemas al utilizar histogramas con macrogrupos uniformes	17
4.3. Mejora mediante bordes de macrogrupos definidos manualmente	17
4.4. Resultados con histogramas adaptativos	18
4.5. Validación de tallies y aplicación de técnicas de reducción de varianza	18
4.6. Síntesis y conclusiones	18
5. Validación Experimental: Conducto Número 5 del Reactor RA-6	21
5.1. Descripción del caso experimental del RA-6	21
5.2. Optimización del resampleo para la fuente experimental	21
5.3. Resultados de simulación en OpenMC y comparación experimental	21
5.3.1. Distribución espacial del flujo en detectores	21
5.3.2. Comparación ^3He : simulación vs. experimento	21
5.4. Discusión sobre resultados y validación	21
A. Implementación Computacional del Método	23
A.1. Código detallado en Python/C++	23
A.2. Pseudocódigo y comentarios	23
A.3. Archivos de configuración XML	23
A.4. Flujo de trabajo práctico	23
Bibliografía	25
Publicaciones asociadas	27
Agradecimientos	29

Índice de figuras

3.1. Distribuciones de x vs y para el primer trackfile. Se observa uniformidad en toda la sección del tubo.	10
3.2. Distribuciones de letargia y μ para el primer trackfile, 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.	10
3.3. Distribuciones de letargia vs μ para el primer trackfile. Se observa la presencia de un conjunto de neutrones graficados como una línea sobre una distribución uniforme de fondo.	11
3.4. 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.	11
3.5. 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	12
3.6. Comparación de la distribución de x entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de la discretización uniforme en la distribución de x debido a que se reduce el ruido a nivel local pero se observa el binnedo uniforme.	13

Índice de tablas

3.1. Divergencia KL parcial y total para la configuración <code>Equal / Equal</code>	12
3.2. Divergencia KL para distintas configuraciones en Trackfile 2.	14
3.3. Divergencia KL en Trackfile 3 para diferentes combinaciones.	15
4.1. Divergencia KL entre distribución original y resampleada en cada caso.	18

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, INSTITUTO BAL-
SEIRO

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 $(\mathbf{E}-\mathbf{r}-\mathbf{\Omega})$ 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.

A partir de las listas generadas, se estima la distribución multidimensional de las partículas en la superficie \mathcal{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

¹Deep penetration problem

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 ($\mathbf{E-r-\Omega}$) 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 resampleo 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.

NOTA: Despues de este capitulo falta agregar otro que sea de presentacion de las herramientas presentadas: por ahora hay que explicar que es KDSOURCE y OpenMC, y como se relacionan entre si. (aunque un poco ya esta). Tambien hay que explicar la divergencia KL (Esta medio comentado en el capitulo del resampleo). Explicar MCPL. y XML. Tambien python, c, y c++.

Capítulo 2

Metodología para la Generación de Fuentes Monte Carlo Mediante Histogramas Multidimensionales

2.1. 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*.

2.2. Definición del espacio de fases ($E-r-\Omega$)

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 .

2.3. 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.

2.4. 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 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 *binning* adaptativo, mostrando claramente las distribuciones estimadas con pocos bins, la distribución real y la diferencia absoluta utilizada para definir nuevos bins.

2.5. 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.

2.6. 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++.

2.7. 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 trackfile. 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.

2.8. 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 3

Evaluación del Método mediante Resampleo en *Trackfiles*

3.1. Metodología del análisis

Para validar el método propuesto, se remuestrearon *trackfiles* generados en simulaciones Monte Carlo previas y se compararon los *trackfiles* obtenidos contra los originales. Estos archivos constituyen conjuntos de datos representativos que permiten verificar si la metodología implementada es capaz de aproximar adecuadamente las distribuciones y correlaciones originales del espacio de fases ($\mathbf{E}-\mathbf{r}-\mathbf{\Omega}$).

La estrategia general consiste en aplicar el método a tres *trackfiles* diferentes, utilizando distintos esquemas de configuración. En cada caso se varían parámetros como el orden de las variables, el número de macrogrupos y microgrupos, y se analiza su impacto en la calidad de la reconstrucción. Además, se contempla la posibilidad de definir manualmente los bordes de los macrogrupos en aquellas variables donde la información previa sobre la geometría o el comportamiento de las partículas permita mejorar la separación de poblaciones con características distintas.

Los principales aspectos del análisis son los siguientes:

- **Orden de variables:** se considera cómo el orden en que se procesan las variables afecta a la fragmentación del *trackfile* original en subconjuntos y, por ende, a la estadística de cada variable de procesamiento, que disminuye a medida que aumentan los macrogrupos. En general, la primera variable se beneficia de la estadística total, debido a que todavía no se ha subdividido en sucesivos subconjuntos, mientras que las siguientes reciben subconjuntos progresivamente más pequeños. Dado que la variable ϕ suele presentar una distribución cercana a uniforme en sistemas con simetría, se ha elegido colocarla en la última posición.
- **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 el primer *trackfile* analizado se analizan los diferentes estilos de binado, que pueden ser de igual ancho, de igual integral o adaptativo, tanto para la definición de los bins de los macrogrupos y microgrupos. Los tres esquemas permiten obtener diferentes aproximaciones de la misma distribución original.

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.

3.2. Análisis del Trackfile 1: haz colimado en tubo de vacío

El primer trackfile analizado fue proporcionado externamente. Corresponde a partículas registradas en una superficie ubicada dentro de un tubo de vacío rodeado por agua. La lista contiene únicamente neutrones que atraviesan la sección del canal, lo cual se corrobora en la proyección x - y , donde se observa una distribución uniforme contenida en un cuadrado, correspondiente a la sección del tubo. La figura 3.1 muestra la proyección de los neutrones en el plano x - y .

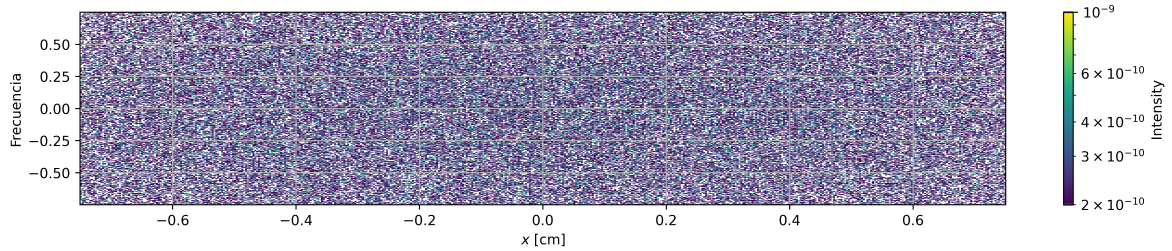


Figura 3.1: Distribuciones de x vs y para el primer trackfile. Se observa uniformidad en toda la sección del tubo.

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 3.2, donde se presentan las distribuciones de letargia y μ para el primer trackfile.

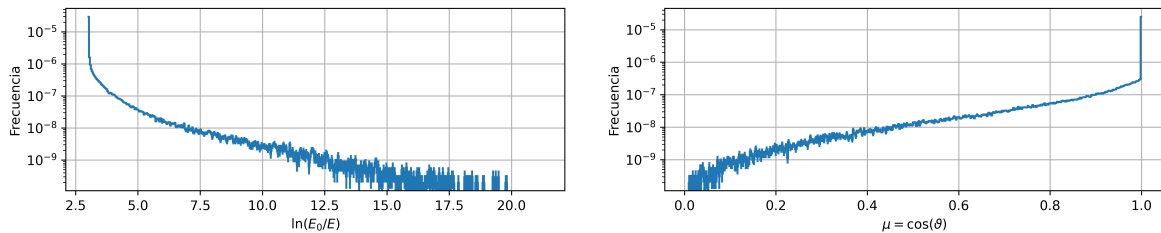


Figura 3.2: Distribuciones de letargia y μ para el primer trackfile, con escala logarítmica en el eje y . Se observa la presencia de dos poblaciones: una concentrada en $\mu = 1$ y letargia mínima, montada sobre una distribución continua de neutrones colisionados.

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 3.3. 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.

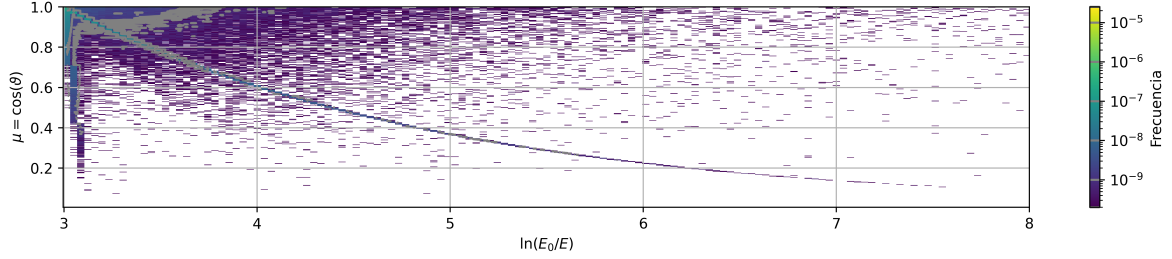


Figura 3.3: Distribuciones de letargia vs μ para el primer trackfile. Se observa la presencia de un conjunto de neutrones graficados como una línea sobre una distribución uniforme de fondo.

3.2.1. Configuración 1: bineado micro y macro uniforme

Se empleó una configuración con macrogrupos y microgrupos de ancho uniforme. Se seleccionaron $n_{\text{macro}} = 8$ y $n_{\text{micro}} = 100$ 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 3.4 y 3.5, donde se comparan las distribuciones de letargia y μ entre el trackfile original y el remuestreado.

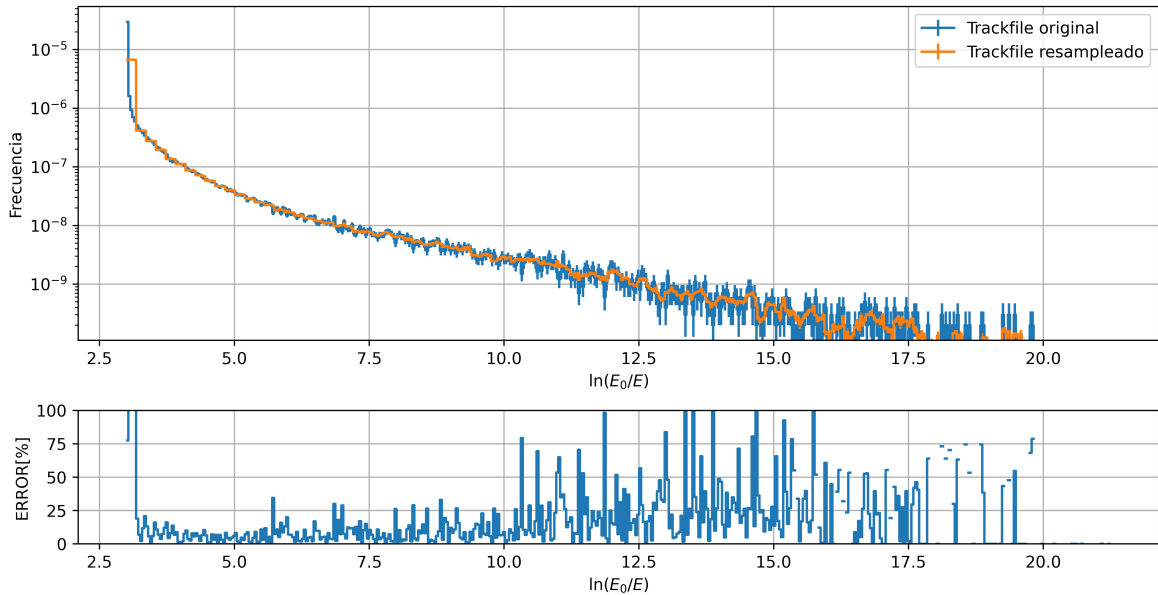


Figura 3.4: Comparación de la distribución de letargia entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de la discretización uniforme en la distribución de letargia.

Además, en las distribuciones espaciales, tanto x como y , se elimina el ruido estadístico original de forma local pero sin suavizado general, reflejando el bineado uniforme. Esto se observa en la figura 3.6, donde se comparan las distribuciones de x entre el trackfile original y el remuestreado.

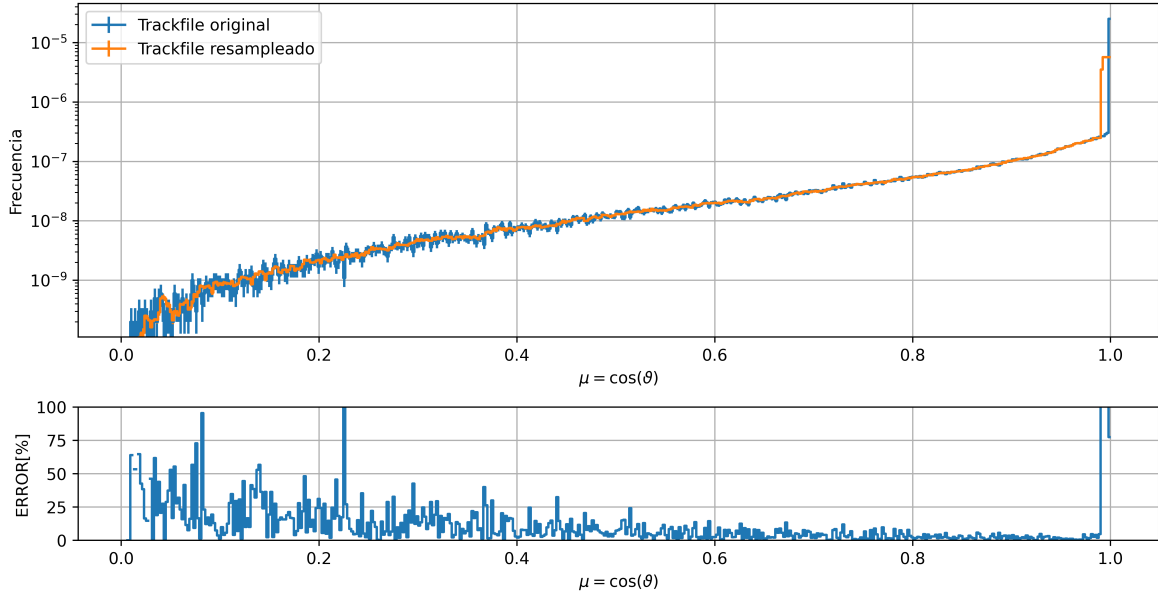


Figura 3.5: Comparacion de la distribucion de μ entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de la discretizacion uniforme en la distribucion de μ .

Las métricas KL resultantes indican errores importantes en variables con alta concentración, especialmente en μ y letargia, tanto en 1D como en 2D:

Tabla 3.1: Divergencia KL parcial y total para la configuración Equal / Equal.

KL 1D		KL 2D	
Parámetro	Valor	Parámetros	Valor
$\ln(E_0/E)$	1.2229	$\ln(E_0/E), x$	1.6981
x	1.0918e-03	$\ln(E_0/E), y$	1.7038
y	1.0679e-03	$\ln(E_0/E), \mu$	3.8917
μ	1.1957	$\ln(E_0/E), \phi$	3.6191
ϕ	1.4702	x, y	1.1812
		x, μ	2.0564
		x, ϕ	2.4558
		y, μ	2.0566
		y, ϕ	2.4674
		μ, ϕ	3.9723
Suma KL 1D	3.8909	Suma KL 2D	25.102

Configuración 2: binning adaptativo (adaptive/adaptive). Al aplicar binning adaptativo tanto en los macrogrupos como microgrupos, se optimiza la ubicación de los bordes para reflejar mejor la densidad local. En letargia se observa una mejora sustancial en la representación de los valores tipo delta, aunque persisten irregularidades en las zonas de letargia alta. Las variables espaciales muestran una mayor suavidad local sin perder detalle global.

Las métricas KL mejoran drásticamente respecto del caso uniforme:

Configuración	$\sum \text{KL 1D [nats]}$	$\sum \text{KL 2D [nats]}$
Adaptive / Adaptive	0.533	10.15

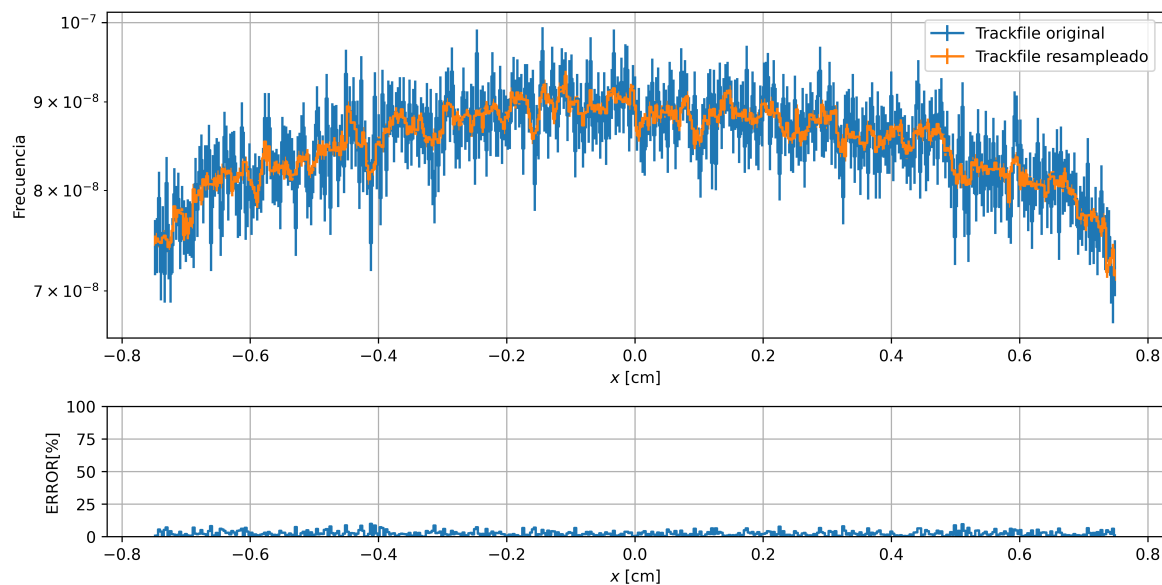


Figura 3.6: Comparación de la distribución de x entre el trackfile original y el trackfile remuestreado. Se observa el efecto de la discretización uniforme en la distribución de x debido a que se reduce el ruido a nivel local pero se observa el binnedo uniforme.

Configuración 3: macrobinning adaptativo, microbinning uniforme. Esta variante mejora parcialmente la resolución estructural de la distribución, especialmente en 2D, pero mantiene el error en 1D cuando hay discontinuidades abruptas. Esto se refleja en un KL total intermedio:

Configuración	$\sum \text{KL 1D [nats]}$	$\sum \text{KL 2D [nats]}$
Adaptive / Equal	1.087	12.56

Configuración 4: macrobinning uniforme, microbinning adaptativo. Esta última configuración aún no ha sido evaluada en detalle, pero se espera que muestre un comportamiento intermedio entre los casos previos. Se incluirá su análisis en una versión posterior.

3.3. Resultados con Trackfile 1

En esta sección se presentan los resultados obtenidos al aplicar el método sobre el primer archivo de tracks. El análisis se realizó utilizando múltiples configuraciones, variando el orden de las variables, la cantidad de macrogrupos y microgrupos.

Se muestran:

- Distribuciones de energía, posición y dirección reconstruidas y su comparación con las originales.
- Curvas de error relativo por variable.
- Mapas de error relativo 2D para las correlaciones seleccionadas.
- Tabla con valores de divergencia KL para distintas configuraciones.

Estos resultados permiten discutir la sensibilidad del método a cada uno de los parámetros de entrada y establecer lineamientos para su elección óptima.

3.3.1. Comparación entre esquema adaptativo y de ancho constante

Como parte del análisis sobre el primer trackfile, se estudió el impacto del esquema de discretización utilizado en los macro y microgrupos. Se comparó explícitamente el rendimiento del esquema adaptativo frente a un esquema de histogramas con ancho constante.

El esquema adaptativo asigna mayor resolución a regiones del espacio de fases con alta estadística, y menor resolución donde los datos son escasos. Esto permite representar con mayor fidelidad las distribuciones sin amplificar el ruido estadístico.

Los resultados muestran una mejora significativa en la reconstrucción cuando se utiliza el esquema adaptativo. Esto se evidencia tanto en los gráficos de error relativo como en los valores de la divergencia KL, donde se observa una reducción consistente al aplicar el binnedo adaptativo.

Esta comparación resalta la importancia de emplear técnicas de binnedo adaptativo como herramienta para preservar la calidad del muestreo, especialmente en regiones con estructuras finas y alta variabilidad estadística.

3.4. Resultados con Trackfile 2

Se repitió el procedimiento metodológico sobre un segundo archivo de tracks con características geométricas y espectrales diferentes al primero, lo cual permite poner a prueba la generalidad del método propuesto.

Al igual que en el caso anterior, se analizaron distintas configuraciones de discretización jerárquica y orden de variables, prestando especial atención a:

- La estabilidad del método ante distribuciones menos suaves o más concentradas espacialmente.
- La sensibilidad de las correlaciones bidimensionales al cambio en el esquema de macrogrupos.
- El comportamiento de la divergencia KL como función de la resolución utilizada.

Los gráficos comparativos muestran una buena reconstrucción general de las distribuciones 1D, aunque se observaron mayores errores relativos en regiones de baja estadística. En cuanto a las correlaciones, se destaca nuevamente la importancia de evitar configuraciones con fragmentación excesiva en las últimas variables del árbol.

Se presenta a continuación una selección representativa de los resultados gráficos y numéricos obtenidos, incluyendo:

- Plots de distribuciones originales vs. reconstruidas.
- Mapas de error relativo 2D para variables espaciales y angulares.
- Tabla comparativa de divergencias KL.

Tabla 3.2: Divergencia KL para distintas configuraciones en Trackfile 2.

Configuración	Macrogrupos	Microgrupos	KL Divergence
Orden A	[8,8,8,8]	[80,80,80,80]	0.021
Orden B	[6,7,8,9]	[60,70,80,90]	0.016
Orden C	[9,8,7,6]	[100,80,60,40]	0.019

3.5. Resultados con Trackfile 3

Finalmente, se aplicó el método sobre un tercer archivo de tracks con características mixtas, presentando una distribución energética más extendida y un patrón angular complejo, lo cual representa un desafío adicional para el muestreo jerárquico.

Se realizaron pruebas similares a las anteriores, enfocándose en:

- Evaluar la robustez del método frente a distribuciones con múltiples picos o simetrías rotas.
- Observar el efecto del esquema de macrogrupos decreciente en variables angulares.
- Validar si se mantiene la tendencia en la divergencia KL al aplicar bineado adaptativo.

Los resultados obtenidos son consistentes con los de los otros casos, aunque se observaron diferencias notables en la reconstrucción de las variables angulares cuando éstas se encontraban en posiciones tempranas dentro del árbol, lo cual sugiere una posible pérdida de fidelidad debido a fragmentación excesiva.

Tabla 3.3: Divergencia KL en Trackfile 3 para diferentes combinaciones.

Configuración	Macrogrupos	Microgrupos	KL Divergence
Esquema uniforme	[6,6,6,6]	[60,60,60,60]	0.024
Esquema creciente	[6,7,8,9]	[60,70,80,90]	0.017
Esquema adaptativo	Variable	Adaptativo	0.012

Estos resultados reafirman la utilidad del esquema adaptativo en escenarios complejos, donde las estructuras locales en el espacio de fases requieren una resolución flexible para ser correctamente representadas.

Capítulo 4

Aplicación al Caso del Canal de Vacío en Agua

4.1. Descripción de la geometría y condiciones de frontera

El caso de estudio planteado consiste en un canal de vacío embebido en un bloque de agua liviana, configurado de forma tal que reproduce condiciones similares a una guía de neutrones, pero en un entorno simplificado y controlado. El sistema se compone de un paralelepípedo de agua de dimensiones $15\text{ cm} \times 15\text{ cm} \times 100\text{ cm}$, dentro del cual se ubica un canal interno de vacío de sección $3\text{ cm} \times 3\text{ cm}$ orientado a lo largo del eje z .

Se define una fuente plana ubicada en la cara de entrada del sistema ($z = 0$), compuesta por neutrones monoenergéticos de $E = 1\text{ MeV}$, perfectamente colimados a lo largo del eje z (i.e., con $\mu = 1$). Esta configuración da lugar a dos poblaciones de neutrones marcadamente diferentes: aquellos que atraviesan el canal de vacío sin colisionar, manteniendo su energía y dirección originales, y aquellos que interactúan con el moderador, sufriendo pérdida de energía y dispersión angular.

4.2. Problemas al utilizar histogramas con macrogrupos uniformes

Se implementó una simulación con desacople en una superficie transversal ubicada en $z = z_0$, registrando las partículas que la atraviesan. El muestreo posterior basado en histogramas con macrogrupos de ancho constante mostró deficiencias notables: algunos macrogrupos intersectaban simultáneamente regiones de agua y vacío, mezclando partículas con características físicas disímiles. Esta superposición genera una pérdida importante en la correlación entre variables, particularmente entre la dirección (μ) y la posición transversal (x, y).

4.3. Mejora mediante bordes de macrogrupos definidos manualmente

Para mitigar esta pérdida de información, se incorporó la posibilidad de definir manualmente los bordes de los macrogrupos en las variables críticas. Esto permitió aislar espacialmente la región correspondiente al canal de vacío, evitando que neutrones colimados se mezclen con partículas moderadas.

Se analizaron tres configuraciones diferentes:

- **Caso A:** definición manual en las variables x e y (espaciales).
- **Caso B:** definición manual en letargia y μ (energética y direccional).
- **Caso C:** bordes definidos en las cuatro variables (x , y , μ , letargia).

Tabla 4.1: Divergencia KL entre distribución original y resampleada en cada caso.

Variable	Caso A	Caso B	Caso C
Letargia	0.112	0.045	0.028
μ	0.295	0.071	0.031
x	0.148	0.121	0.037
y	0.159	0.130	0.035

4.4. Resultados con histogramas adaptativos

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.

Los resultados mostraron una mejora significativa en la reconstrucción de las distribuciones 1D y 2D, así como en las métricas de error globales como la divergencia de Kullback-Leibler (KL) y el error medio absoluto.

4.5. 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.

4.6. 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 multi-modales 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 ^3He : 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

