

El Método de Monte Carlo para la Solución de la Ecuación de Transporte

En la práctica, muchos problemas de transporte no se pueden resolver por métodos analíticos, por lo que hay que hacer uso de métodos numéricos, tales como los basados en integración numérica o los basados en el método de Monte Carlo. La primera categoría consiste esencialmente de varias técnicas para integrar numéricamente una ecuación integral o diferencial. En el método de Monte Carlo, la historia de los neutrones se reproduce en detalle en una computadora. Es importante recordar que en cada etapa de la vida de un neutrón, su comportamiento futuro se puede determinar con ayuda de varias funciones de distribución de probabilidad. Por ejemplo, la localización de una interacción se determina con la función $p(x) = \sum_t \exp(-\sum_t x)$; el tipo de interacción se determina por tasas de secciones eficaces (por ejemplo, σ_s / σ_t es la probabilidad de que una interacción sea una dispersión elástica); el ángulo de dispersión del neutrón (si es dispersado) se obtiene de la sección eficaz diferencial ($\sigma_s(\mathcal{Q})$); y así sucesivamente. En un cálculo de Monte Carlo, estas distribuciones de probabilidad son muestreadas por una computadora de tal forma que las historias calculadas de los neutrones sean reproducidas exactamente como ocurriría en un problema físico real. Por lo tanto, con este método es posible obtener paso por paso el “trayecto aleatorio” de las partículas a través del medio, obteniendo así la distribución exacta de los neutrones.

Dado que el método de Monte Carlo se basa esencialmente en conceptos estadísticos, el resultado obtenido no es único, sino una estimación con un intervalo de confianza alrededor del “valor verdadero”. Por lo anterior, una de las desventajas del método es la magnitud del error obtenido asociado con el resultado. Con la finalidad de reducir el error a un nivel aceptable, se requiere seguir un gran número de historias de partículas desde su “nacimiento” hasta su “muerte”, lo que implica tiempos de cómputo muy grandes.

Trayectoria de las Partículas.

La vida de una partícula inicia con su nacimiento, ya sea por una fuente de neutrones externa o por una fisión, y termina con la absorción o con el escape del sistema. Los eventos que ocurren durante la vida del neutrón se registran y se convierten en la historia del neutrón, pero, como se mencionó anteriormente, debido a que la historia de una sola partícula no es representativa del sistema, se debe evaluar una cantidad adecuada de historias para describir realmente los fenómenos del sistema de interés.

Considérese la trayectoria de una partícula que viaja a través de un medio homogéneo, dado que la partícula es dispersada frecuentemente, su trayectoria será en zig-zag, tal como se muestra en la Figura 1. Suponiendo que la partícula se origina en la posición A , con dirección y energía conocidas, al inicio tendrá un “vuelo libre” hasta que tiene una colisión con algún átomo del medio, que podría resultar en la absorción de la partícula y la inmediata terminación de su historia. Pero, suponiendo que la interacción es de dispersión, la partícula sufre un cambio en energía y en dirección. Tanto el cambio en energía como el cambio en dirección son procesos estadísticos (es decir, no hay una única energía y dirección después de la dispersión), para los cuales hay una distribución de probabilidad. En la Figura 1 se observa como

después de la primera dispersión, la misma partícula tiene otro “vuelo libre” y posteriormente colisiona, y así sucesivamente.

Para rastrear a la partícula durante su viaje es necesario conocer: sus coordenadas espaciales (x_0, y_0, z_0) , las coordenadas esféricas de su dirección (θ, ϕ) y su energía. Estas variables son suficientes para definir el estado, α , de la partícula, donde:

$$\alpha \equiv \alpha(x, y, z; E; \theta, \phi) \quad (1)$$

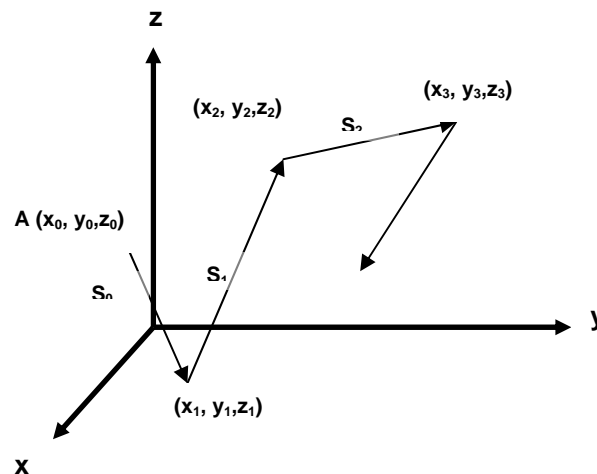
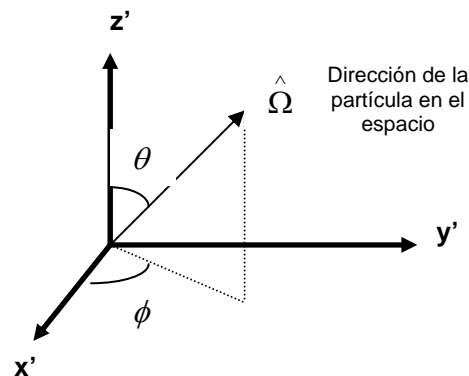


Figura 1. Trayectoria Aleatoria de una Partícula a través de un Medio.

El sistema de coordenadas esféricas que definen la dirección de la partícula se ilustra en la Figura 2.



Nota: el sistema de coordenadas ortogonal (x', y', z') es paralelo al sistema básico de referencia (x, y, z) de la figura 1.

Figura 2. Dirección de la Partícula en Coordenadas Esféricas (θ, ϕ) .

La trayectoria de una partícula se puede construir de colisión a colisión como una sucesión de estados $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$, donde el i -ésimo estado es:

$$\alpha_i \equiv \alpha_i(x_i, y_i, z_i; E_i; \theta_i, \phi_i) \quad (2)$$

Por lo tanto, en el i -ésimo estado, una partícula tiene las coordenadas espaciales del punto en donde ocurre la colisión y tanto la energía y dirección de la partícula después de dicha colisión. A excepción del estado inicial, cada estado sucesivo esta en función del estado previo y de las leyes de dispersión obedecidas por la partícula en el material de interés. Por ejemplo, el estado α_0 comienza con condiciones iniciales y por muestreo aleatorio de las distribuciones de probabilidad correspondientes a cada tipo de interacción se determina el estado α_1 , y así sucesivamente, construyendo de esta forma la historia de la vida de cada partícula.

Obviamente, se requiere de procedimientos matemáticos para seleccionar la posición de la siguiente colisión, así como la nueva energía y dirección de la partícula, si es que sobrevive a una colisión. Considérese un partícula que ha sufrido su i -ésima colisión (una dispersión), las coordenadas del punto de su siguiente colisión se obtienen de la siguiente manera: si s es la longitud de la trayectoria que la partícula viaja hasta su próxima colisión, la probabilidad de que la partícula viaje la distancia s sin tener una interacción es $e^{-\Sigma_t s}$. La probabilidad de que la partícula tendrá una interacción en el intervalo ds es $\Sigma_t ds$, por lo tanto, la probabilidad de que la partícula tendrá una interacción entre s y $s + ds$ es:

$$\Sigma_t e^{-\Sigma_t s} ds, \quad (3)$$

donde Σ_t es la sección eficaz macroscópica total. El siguiente paso es establecer un procedimiento para seleccionar aleatoriamente un valor de s (s_i) de la función de probabilidad dada por la ecuación (3). Una vez determinado el valor de s_i , las coordenadas de la siguiente colisión se obtienen de:

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + s_i (\sin \theta_i \cos \phi_i) \\ y_{i+1} &= y_i + s_i (\sin \theta_i \sin \phi_i) \\ z_{i+1} &= z_i + s_i (\cos \theta_i) \end{aligned} \quad (4)$$

De forma similar, la energía de la partícula después de la dispersión se obtiene muestreando la función de probabilidad apropiada. Por ejemplo en el caso de un fotón el proceso de dispersión es la dispersión Compton, y la función de distribución correspondiente está dada por la teoría de Klein-Nishina, obteniendo así la nueva energía, E_i . Los ángulos "locales" después de la dispersión (θ_0, ϕ) también pueden determinarse, θ_0 es el ángulo de deflexión y ϕ es el ángulo azimutal (ver Figura 3). Usualmente el ángulo ϕ es distribuido aleatoriamente en el intervalo de 0 a 2π . Finalmente, con los ángulos "locales" (θ_0, ϕ) se puede determinar la nueva dirección de la partícula, (θ_i, ϕ_i) .

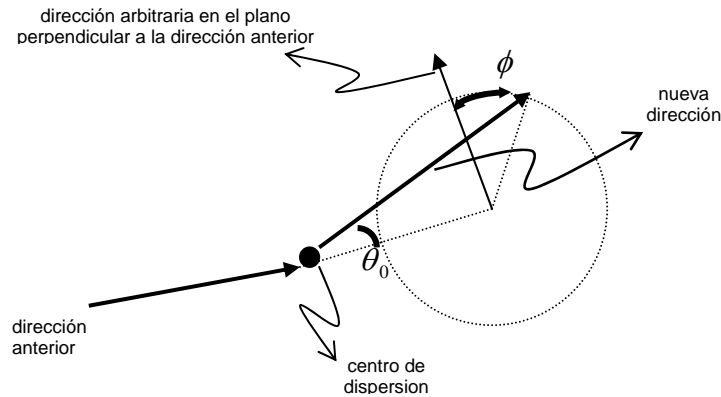


Figura 3 Ángulos “locales” de Dispersión de la Partícula.

Hasta aquí se ha descrito como se obtienen teóricamente las trayectorias de las partículas, conforme se difunden a través de un medio, desde su nacimiento hasta su absorción o hasta que escapan del sistema.

Técnicas de Muestreo Aleatorio.

Por ahora es claro que con el método de Monte Carlo se intenta deducir el comportamiento promedio de todas las partículas en un medio, simplemente muestreando aleatoriamente el comportamiento de algunas de ellas.

El requisito fundamental para desarrollar el método de Monte Carlo es relacionar un número aleatorio a un evento físico, de tal forma que estén firmemente ligados a las leyes de probabilidad. Esto generalmente se cumple obteniendo una función de densidad de probabilidad, $p(x)$, la cual describe la frecuencia relativa de su variable aleatoria x y definida en el intervalo de todos los valores posibles que puede tomar x . En la sección anterior se mostró un ejemplo importante, es decir: $\sum_t e^{-\Sigma_t s}$, relacionada con la longitud de la trayectoria de la partícula. Otro ejemplo importante es la función de distribución de Maxwell-Boltzmann, para la distribución de energía de los neutrones en equilibrio térmico con los átomos del medio, la cual está dada por:

$$n(E) = cte E^{1/2} e^{(-E/kT)} \quad (5)$$

Más formalmente, una función de densidad de probabilidad (*pdf*, por sus siglas en inglés *probability density function*) se define como sigue. Sea $prob(x < X < x + \Delta x)$, la probabilidad de que una variable aleatoria tenga valores en el intervalo $(x, x + \Delta x)$. La *pdf* $p(x)$ está relacionada a esta probabilidad por la igualdad:

$$\text{prob}(x < X < x + \Delta x) = p(x) \text{ como } \Delta x \rightarrow 0,$$

Usando notación diferencial, se puede interpretar $p(x)dx$ como la probabilidad de ocurrencia de x en el intervalo $(x, x + dx)$ o:

$$p(x)dx = \begin{array}{l} \text{probabilidad de que ocurrirá una} \\ \text{interacción entre } x \text{ y } x+dx. \end{array}$$

si x ocurre en un intervalo continuo, entonces:

$$\text{prob}(a < x < b) = \int_a^b p(x)dx. \quad (6)$$

Dado que una *pdf* $p(x)$ describe la frecuencia relativa de ocurrencia de x sobre todo el intervalo de posibles valores de x , se sigue que:

$$\begin{array}{l} 0 \leq p(x), \\ \int_{-\infty}^{\infty} p(x)dx = 1 \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{para toda } x \end{array} \quad (7)$$

En la práctica, la función $p(x)$ puede ser continua como se definió anteriormente, o puede ser discreta cuando hay un número finito de posibles resultados. Por ejemplo, el espectro de energía de los neutrones de fisión $\chi(E)$, es una función de densidad de probabilidad continua. Un ejemplo de una función discreta se puede construir notando que σ_a / σ_t y σ_s / σ_t son las probabilidades de absorción y dispersión en un material, respectivamente, con σ_t la sección eficaz microscópica total.

Descripción del Código MCNP-4B.

El código *MCNP-4B* (por sus siglas en inglés: *Monte Carlo N-Particle* versión 4B), es uno de los códigos más utilizados en física de reactores y considerado como una referencia. Es un código de transporte de propósitos generales y geometría generalizada que utiliza el método numérico de Monte Carlo para la solución de problemas y que puede usarse en diferentes modalidades: transporte de neutrones, fotones o electrones, transporte de neutrones/fotones, neutrones/fotones/electrones, fotones/electrones o electrones/fotones, además de cálculos de criticidad de sistemas físiiles con la obtención de un factor de multiplicación de neutrones, k_{eff} . Sus aplicaciones pueden ser muy variadas: seguridad nuclear, cálculo de blindajes, análisis y diseño de detectores, dosimetría personal, etc. El código emplea una biblioteca de datos nucleares continúa en energía, basada principalmente en las evaluaciones del ENDF/B-VI (por sus siglas en inglés *Evaluated Nuclear Data File*) y del ENDL (por sus siglas en inglés *Evaluated Nuclear Data Library*). A continuación se da una descripción general del método de Monte Carlo para realizar cálculos de criticidad.

Cálculos de Criticidad.

Como se sabe, en cálculos de criticidad, es de gran importancia estimar el valor del factor de multiplicación efectiva de neutrones (k_{eff}). En estos cálculos, un grupo de historias de neutrones se refiere a un ciclo de k_{eff} (en teoría de reactores se define como una generación de neutrones), donde el factor de multiplicación está dado por la razón del número de neutrones generados en los eventos de fisión que se presentan en el ciclo, entre el número de neutrones cuyas historias son evaluadas en este ciclo (es decir, el número de neutrones al inicio de la generación). El valor esperado del factor de multiplicación se estima, promediando sobre los eventos en el ciclo de k_{eff} . De la misma forma, también se puede obtener el valor esperado de la probabilidad de fuga o la fracción de eventos que llevan a captura. El error relativo en la estimación de k_{eff} usualmente disminuye conforme el número de ciclos de k_{eff} aumenta, por lo que se necesita un gran número de ciclos para obtener una buena estimación. El factor de multiplicación se estima mediante la siguiente expresión:

$$\bar{k} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k_i \quad (8)$$

donde \bar{k} es el factor de multiplicación estimado para el sistema de interés, y k_i es el factor de multiplicación estimado en el i -ésimo ciclo.

La aproximación de Monte Carlo se puede resumir como sigue: una secuencia de números aleatorios r_i ($0 < r_i < 1$) se usa para producir una distribución aleatoria de cantidades que simulan el problema de interés. Un ejemplo de cómo funciona el método de Monte Carlo para obtener el factor de multiplicación en un medio multiplicativo es el siguiente:

1. Para el primer ciclo del cálculo del factor de multiplicación de neutrones (k_{eff}), determinar la posición inicial del neutrón.
2. Utilizar un número aleatorio para seleccionar la energía del neutrón.
3. Usar el siguiente número aleatorio para determinar la dirección coseno del neutrón.
4. Determinar la localización de la siguiente colisión con el siguiente número aleatorio (la distancia que recorra el neutrón depende de la sección eficaz del material).
5. Verificar la nueva posición del neutrón para determinar si ha escapado del sistema; si esto ocurre, agregar un uno a los escapes totales y regresar al paso 1 empezando otra historia o ciclo; de otra forma, continuar.
6. Determinar qué tipo de interacción ocurrió en la nueva posición basado en el siguiente número aleatorio. Cada tipo de interacción tiene asociada una sección eficaz que determina su probabilidad de ocurrencia:
 - a) Si la interacción es una dispersión, determinar la energía del neutrón después de la dispersión utilizando el siguiente número aleatorio. Continuar en el paso 3 para saber la trayectoria del neutrón dispersado.
 - b) Si la interacción es una absorción, regresar al paso 1 y empezar otro ciclo con un nuevo neutrón.

- c) Si la interacción es una fisión, determinar cuántos neutrones se producen en este evento de fisión (utilizando las bibliotecas del código) y determinar el número total de neutrones que se han producido en el ciclo. También determinar la posición de los neutrones que se produjeron en la fisión para que sirvan como inicio de otro ciclo (esto reemplaza al paso 1 en futuros ciclos de k_{eff}).
7. Cuando se han completado las historias que se han solicitado (las suficientes para una estadística adecuada), evaluar la k_{eff} dividiendo el número de nuevos neutrones creados en este ciclo por el número de historias evaluadas en el ciclo.

Repetir el proceso para tantos ciclos como sean requeridos para obtener una estadística apropiada.

Estimación del Error.

MCNP da los resultados en forma de conteos (**tallies**) relacionados a la corriente de partículas, flujo de partículas y a la deposición de energía, donde un **tally** es la cantidad a estimar (**score** promedio), obtenido al sumar todos los **scores** de todas las historias. Los **tallies** de MCNP son normalizados por partícula iniciadora y son impresos en la salida, acompañados por un segundo número, R , que es el error relativo estimado y que se define como la desviación estándar estimada del promedio (S_x) dividida por el promedio estimado (\bar{x}). En MCNP, las cantidades requeridas para estimar este error, son calculadas después de cada historia completa de Monte Carlo, que considera el hecho de que las diferentes contribuciones a un **tally** de la misma historia están correlacionadas. Para un **tally** bien comportado, R será proporcional a $1/\sqrt{N}$ donde N es el número de historias, de tal forma que si se desea disminuir a la mitad R , se debe incrementar el número total de historias cuatro veces. Para un **tally** pobremente comportado, R puede incrementarse conforme el número de historias incrementa.

El error relativo estimado se puede usar para obtener intervalos de confianza alrededor del promedio estimado, permitiendo hacer una declaración acerca de cuál es el resultado verdadero. El Teorema del Límite Central establece que conforme N tiende a infinito hay una probabilidad del 68% de que el resultado verdadero se encuentre en el intervalo $\bar{x} \pm R$, una probabilidad del 95% en el intervalo $\bar{x} \pm 2R$ y una probabilidad del 98% en el intervalo $\bar{x} \pm 3R$. Una declaración respecto a la exactitud requiere un análisis detallado de las incertidumbres en los datos físicos, modelado, técnicas de muestreo y aproximaciones, etc., usados en un cálculo.