



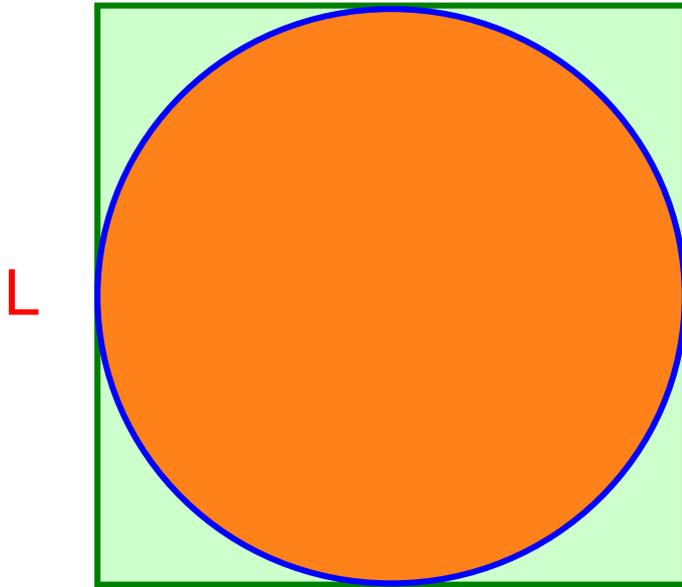
MÉTODO DE MONTE CARLO MCNP

Claudio C. Conti
www.cccconti.com/instnuc

Introdução

- ▶ **O que é Monte Carlo?** → O nome MONTE CARLO foi dado à um tipo de método matemático por cientistas que trabalhavam no desenvolvimento de armas nucleares em Los Alamos (USA) – PROJETO MANHATTAN.
- ▶ **Que método matemático seria este?** → A essência do método seria a criação de um “jogo” de probabilidades cujo comportamento serviria para estudar algum fenômeno. Simulação de processos estatísticos.

Exemplo



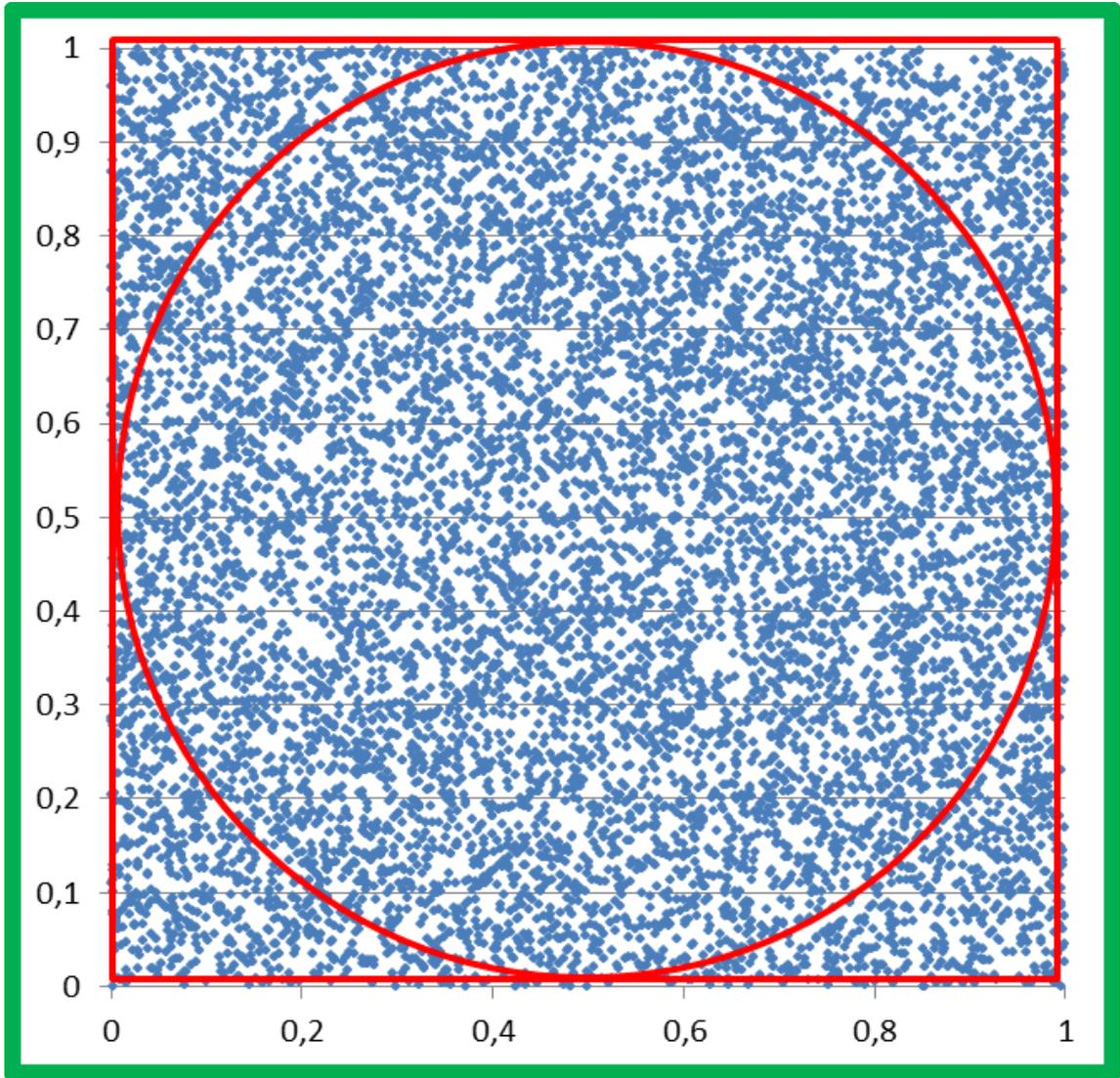
$$\frac{\textit{área do círculo}}{\textit{área do quadrado}} = ?$$

Como resolver esta questão com duas formas de bolo e a chuva?

Método analítico

$$\frac{\textit{área do círculo}}{\textit{área do quadrado}} = \frac{\pi \left(\frac{1}{2}\right)^2}{1^2} = \frac{\pi}{4} = 0.785398$$

10000

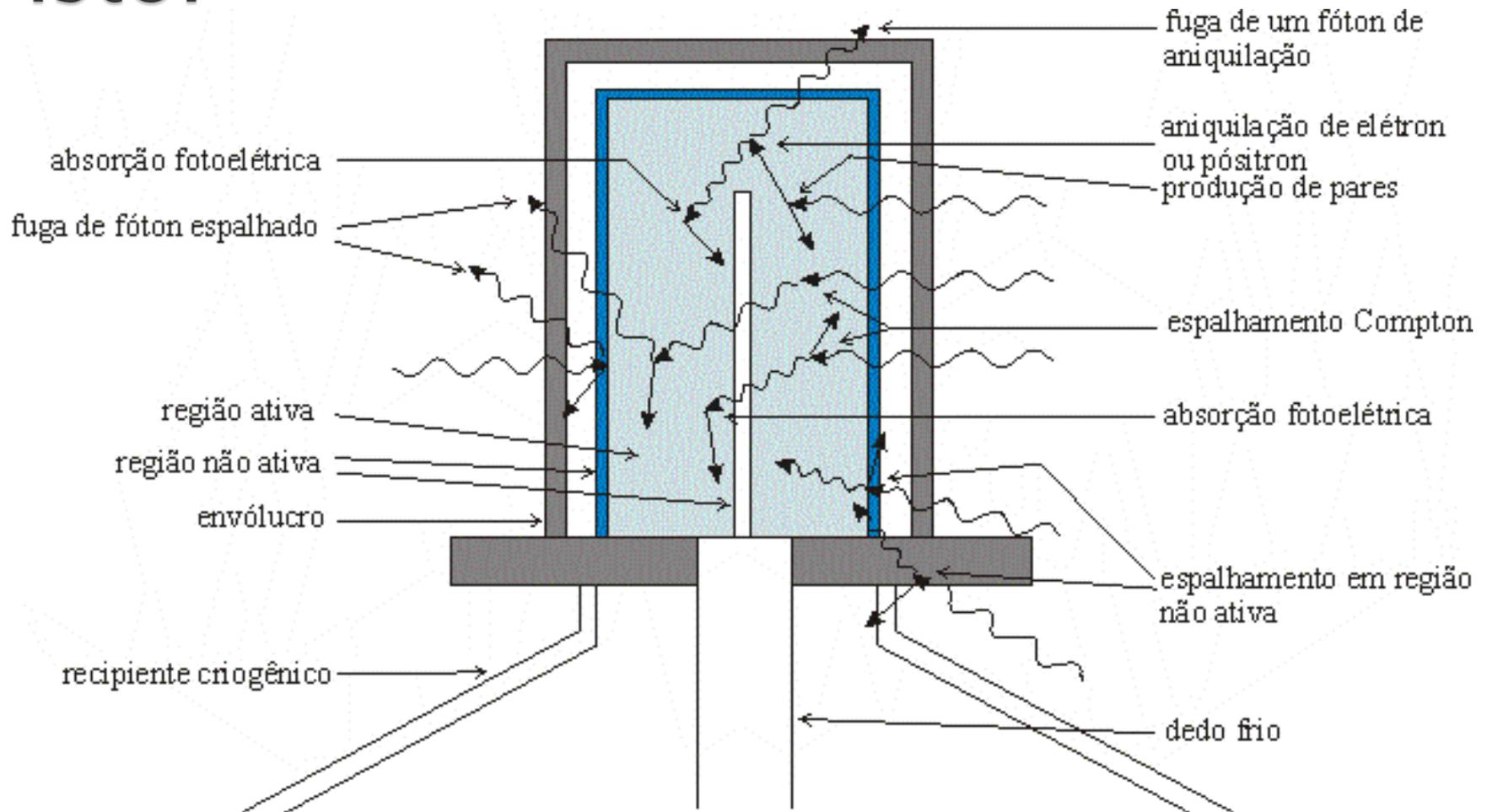


Método Monte Carlo

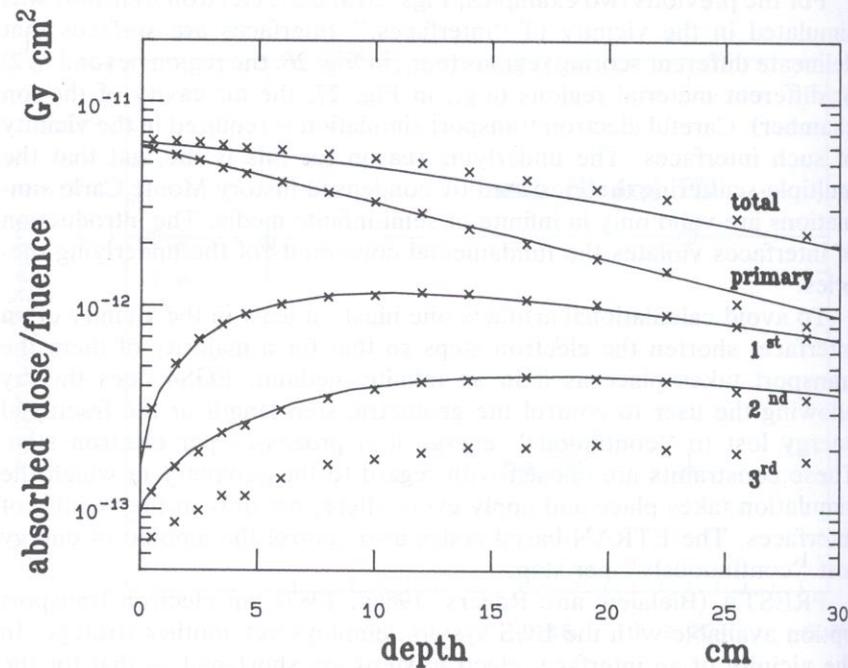
histórias	razão circ/quad
10	0.9
100	0.74
1000	0.795
10000	
100000	0.78569
1000000	0.785154
10000000	0.7852243



Qual método escolher para avaliar isto?

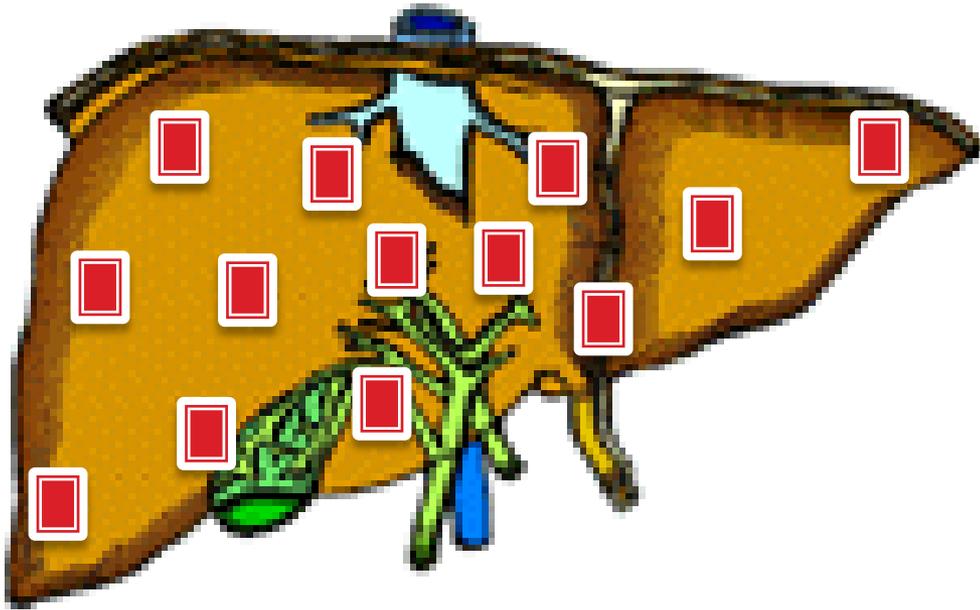


Exemplo de cálculo



Cálculo por Monte Carlo (x) e analítico (linhas) dos componentes de dose versus profundidade para um feixe gama de ⁶⁰Co em água. Componentes originários do feixe primário, primeira, segunda e terceira interação Compton, assim como a dose total são apresentados. Terceira interação apenas por MC.

Cálculo de dose em fígado



01 dosímetro não é representativo do órgão todo.

Grande número de dosímetros alteram o campo de radiação.

Exemplo

Simulando 1 fóton com 2 possibilidades de interação
(Compton e produção de pares)

Deve-se determinar:

- ✓ Distância percorrida até interação;
- ✓ Natureza da interação.

$$\Sigma_{\text{Total}} = \Sigma_{\text{Compton}} + \Sigma_{\text{ppar}}$$

Gera-se 2 núm

Ver planilha Excel!!!!

Sabe-se que :

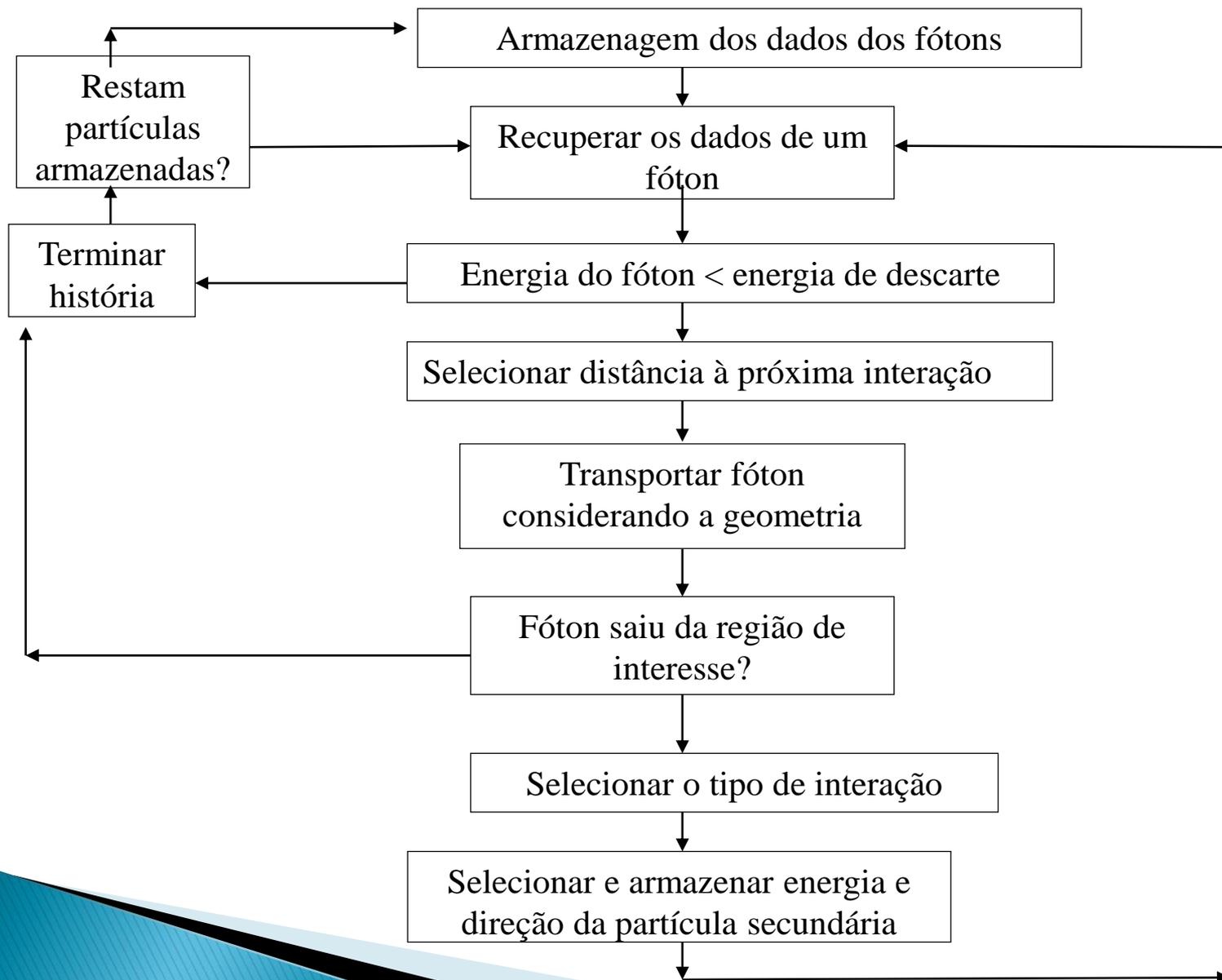
- ✓ O caminho percorrido obedece a uma distribuição exponencial;
- ✓ O caminho médio é $\Sigma_{\text{Total}}^{-1}$; onde: $\Sigma_{\text{Total}} = \Sigma_{\text{Compton}} + \Sigma_{\text{ppar}}$

Tem-se:

$$x(\text{cm}) = -\frac{1}{\Sigma_{\text{Total}}} \ln R1 \quad \text{onde } x \text{ é o caminho percorrido;}$$

Caso $R2 \leq \Sigma_{\text{Compton}} / \Sigma_{\text{Total}} \rightarrow$ Compton
Caso $R2 > \Sigma_{\text{Compton}} / \Sigma_{\text{Total}} \rightarrow$ Produção de pares

Fluxograma de transporte de fótons



Código MC

Um código de simulação pelo método de Monte Carlo possui 4 componentes principais:

- ▶ Dados da seção de choque de todos os processos considerados na simulação;
- ▶ O algoritmo usado para o transporte das partícula;
- ▶ O método utilizado para especificação da geometria do problema e determinação da grandeza física que se deseja determinar;
- ▶ Análise da informação obtida.

CÓDIGO DE MONTE CARLO MCNP

» Monte Carlo N-Particle

Características

- ▶ MCNP é um código geral, energia contínua, geometria generalizada, tempo dependente, transporte por Monte Carlo de combinações de nêutron-fóton-elétron.
- ▶ Pode ser usado nos modos:
 - somente nêutrons;
 - somente fótons;
 - somente elétrons;
 - nêutron-fóton;
 - fóton-elétron;
 - nêutron-fóton-elétron.
- ▶ Nêutrons de $10E-11$ MeV à 20 MeV.
- ▶ Fótons e elétrons de 1keV à 100GeV.

Lembre-se

1. Defina a geometria e a fonte com precisão;
2. Não é possível recuperar informação perdida;
3. Questione a estabilidade e confiabilidade dos resultados;
4. O número de histórias não é indicativo da qualidade do resultado.

Formato do arquivo de entrada

- ▶ Mensagem inicial – opcional
- ▶ Linha em branco – opcional
- ▶ Título
- ▶ Célula 1
- ▶ Célula 2
- ▶ Célula n
- ▶ Linha em branco
- ▶ Superfície 1
- ▶ Superfície 2
- ▶ Superfície n
- ▶ Linha em branco
- ▶ Dados 1
- ▶ Dados 2
- ▶ Dados n
- ▶ Linha em branco para terminar – recomendado

Exemplo

```
c somente o cristal
c23456789
c cell cards
  1  1  -1.205e-3  1 -2 10 -11 20 -21
  2  2  -5.86      2 -3 10 -11 20 -21
  3  0                                -1:3:-10:11:-20:21
c end

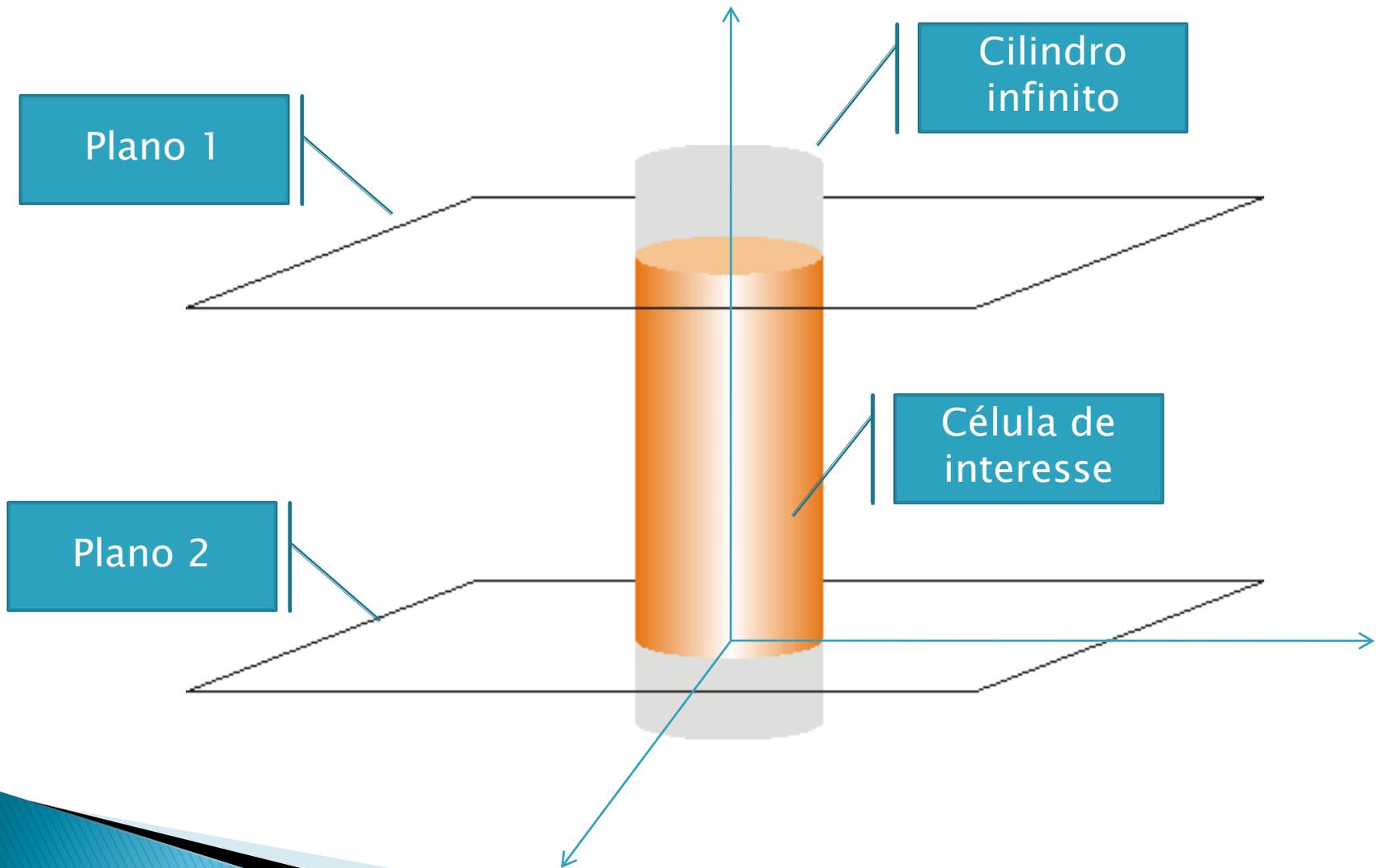
c slab surfaces
  1  py  0
  2  py  1.4
  3  py  1.6
 10  px -.15
 11  px  .15
 20  pz -.15
 21  pz  .15
c end

c data cards
mode p e
phys:e
c cell and surfaces parameter
imp:p 1 1 0
imp:e 1 1 0
c source card
sdef pos=0 .1 0 cel=1 erg=0.1 wgt=1 par=2
c material card
  m1 008000 0.30 007000 0.70          $ ar
  m2 048000 0.90 030000 0.10 052000 1  $ CZT
c tally
  f8:p,e 2
  e8 0 .0001 598i .06
  nps 1e3
```

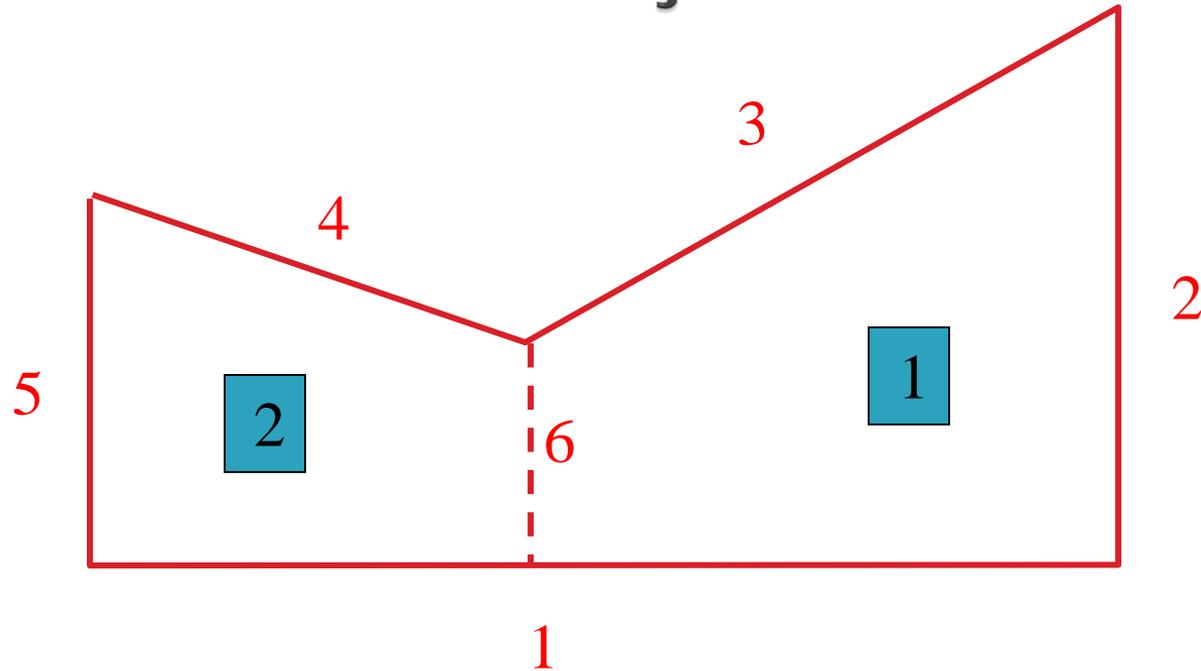
Células

- ▶ Planos, cilindros e cones são infinitos em extensão;
- ▶ Sentido
 - Planos
 - Acima → “+”
 - Abaixo → “-”
 - Cilindros e esferas
 - Dentro → “-”
 - Fora → “+”
- ▶ As células são definidas por uma ou mais superfícies;
- ▶ As dimensões são expressas em centímetros.

Exemplo



Células - interseção → “ “

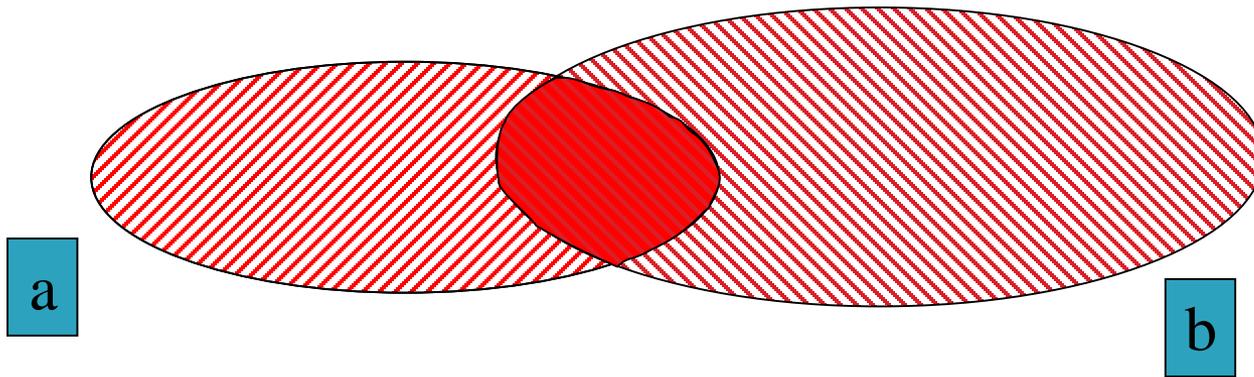


Descrição das células

1 0 1 -2 -3 6

2 0 1 -6 -4 5

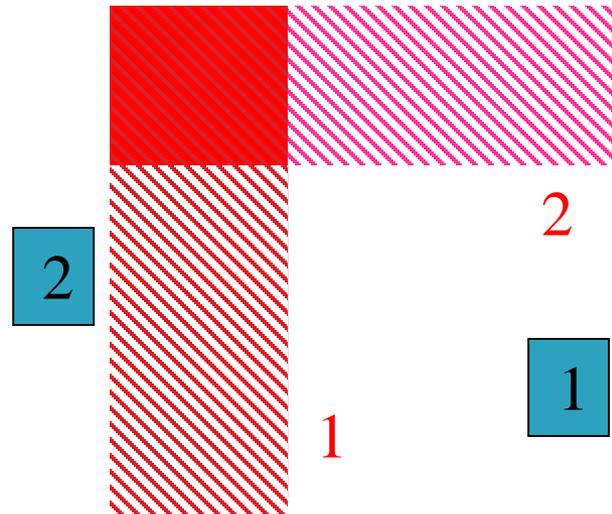
Células - união \rightarrow “:”



Região hachurada

$a : b$

Células - união \rightarrow “:”

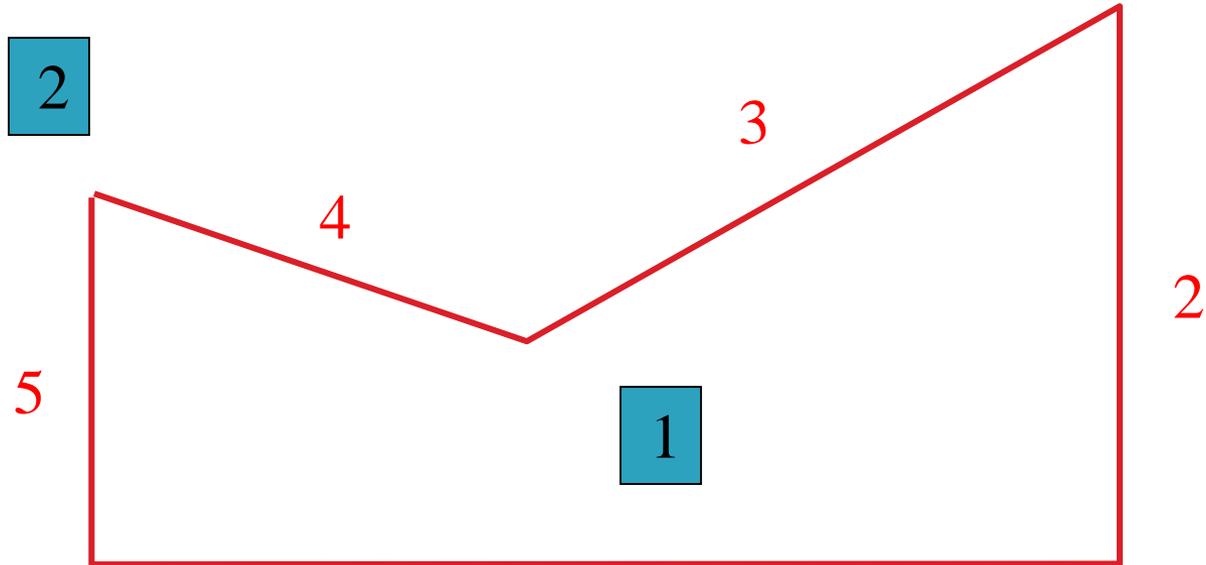


Descrição das células

1 0 1 -2 ...

2 0 -1 : 2 ...

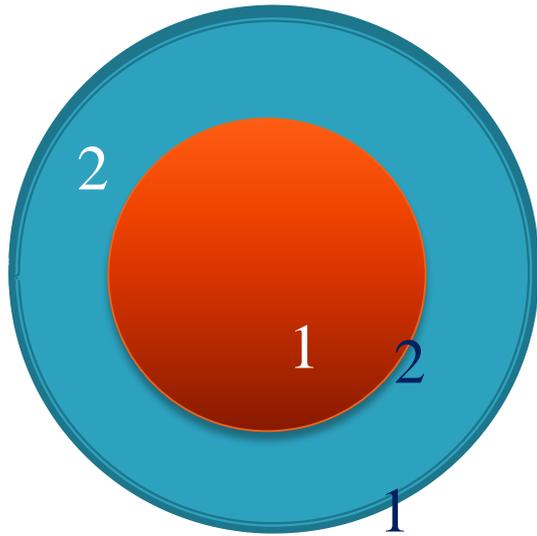
Células - união \rightarrow “:”



1

Descrição das células	
1	0 1 -2 (-3 : -4) 5
2	0 -5 : -1 : 2 : 3 4

Células - complemento \rightarrow “#”



Descrição das células

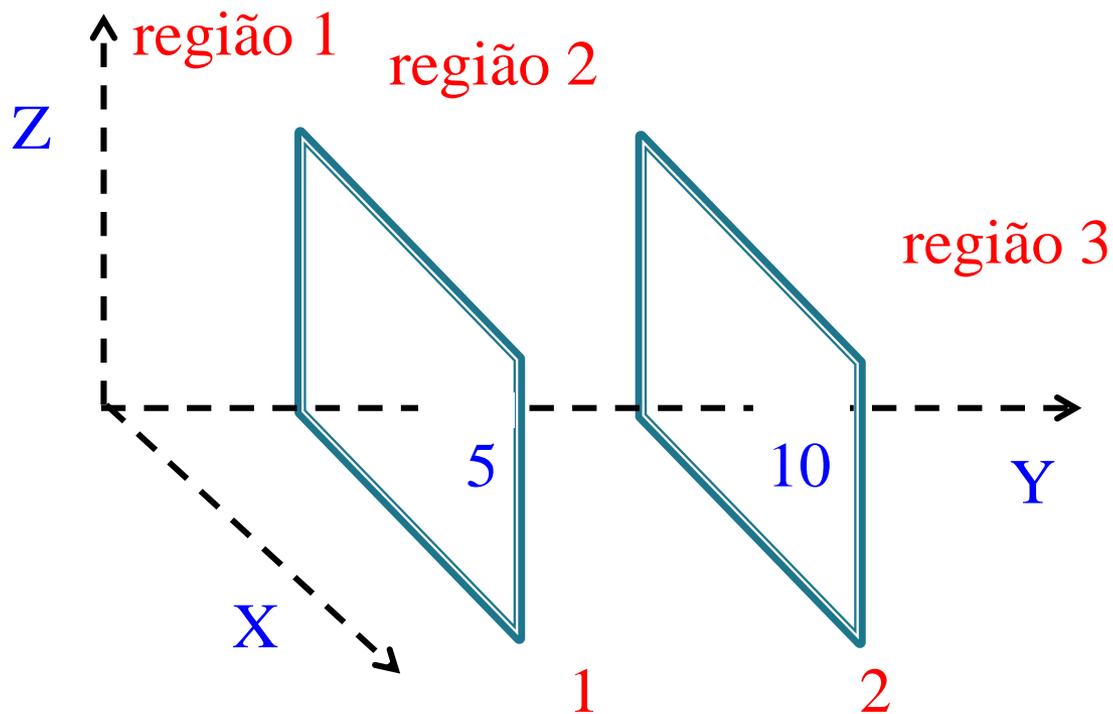
1 0 -2

2 0 -1 #1

Há outra opção?
Qual?

Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries
P	Plane ↓	General	$Ax + By + Cz - D = 0$	$ABCD$
PX		Normal to X-axis	$x - D = 0$	D
PY		Normal to Y-axis	$y - D = 0$	D
PZ		Normal to Z-axis	$z - D = 0$	D
SO	Sphere ↓	Centered at Origin	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
S		General	$(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} R$
SX		Centered on X-axis	$(x - \bar{x})^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} R$
SY		Centered on Y-axis	$x^2 + (y - \bar{y})^2 + z^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} R$
SZ		Centered on Z-axis	$x^2 + y^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{z} R$
C/X	Cylinder ↓	Parallel to X-axis	$(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{y} \bar{z} R$
C/Y		Parallel to Y-axis	$(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \bar{z} R$
C/Z		Parallel to Z-axis	$(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2 - R^2 = 0$	$\bar{x} \bar{y} R$
CX		On X-axis	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CY		On Y-axis	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$	R
CZ		On Z-axis	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$	R
K/X	Cone ↓	Parallel to X-axis	$\sqrt{(y - \bar{y})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} t^2 \pm 1$
K/Y		Parallel to Y-axis	$\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (z - \bar{z})^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} t^2 \pm 1$
K/Z		Parallel to Z-axis	$\sqrt{(x - \bar{x})^2 + (y - \bar{y})^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$\bar{x} \bar{y} \bar{z} t^2 \pm 1$
KX		On X-axis	$\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - \bar{x}) = 0$	$\bar{x} t^2 \pm 1$
KY		On Y-axis	$\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - \bar{y}) = 0$	$\bar{y} t^2 \pm 1$
KZ		On Z-axis	$\sqrt{x^2 + y^2} - t(z - \bar{z}) = 0$	$\bar{z} t^2 \pm 1$
				± 1 used only for 1 sheet cone

Placas paralelas



células

1 0 -1

2 0 1 -2

3 0 2

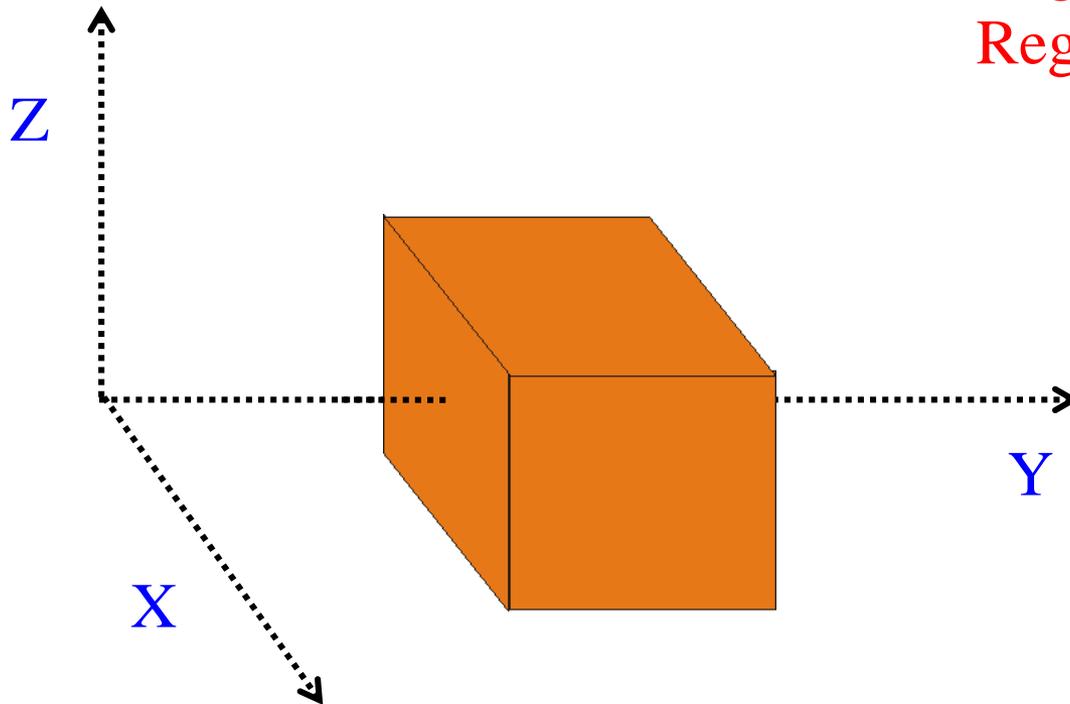
planos

1 py 5

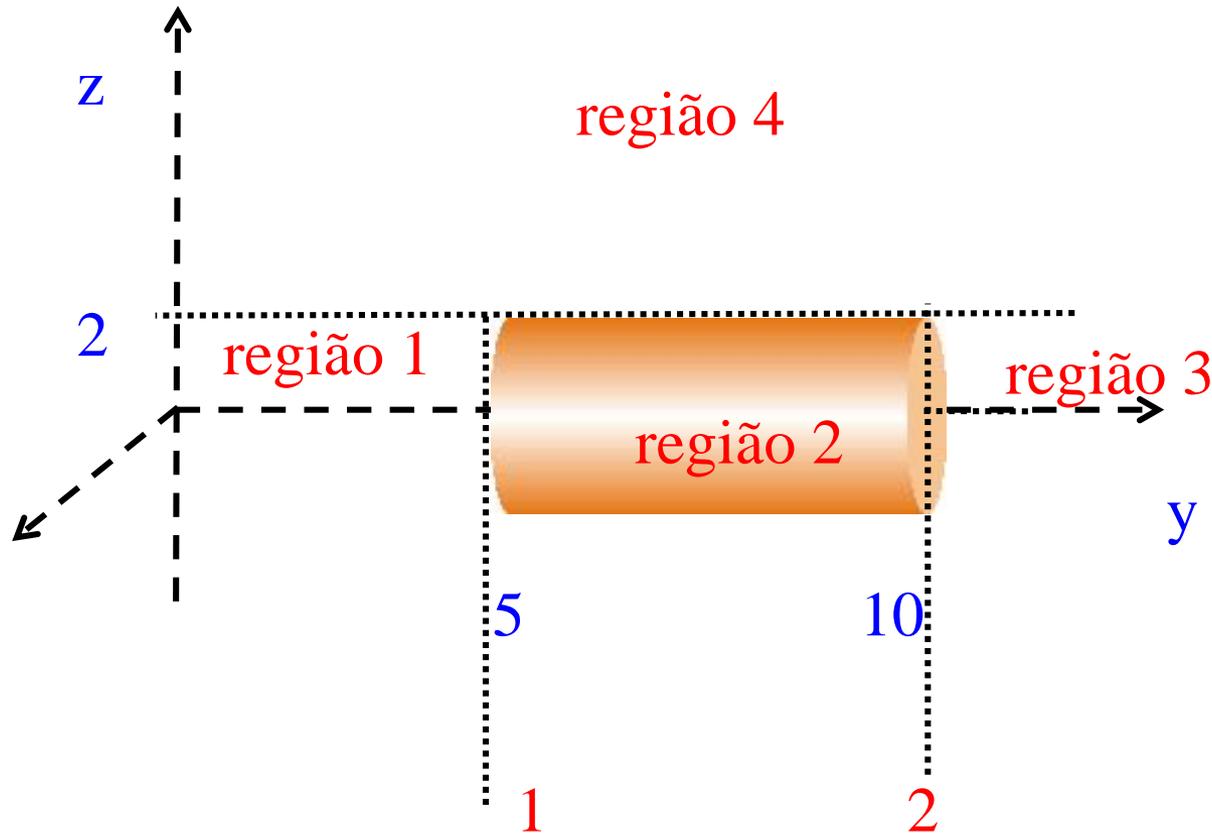
2 py 10

Cubo

Região 1 – interior do cubo
Região 2 – fora do cubo



Cilindro



células

1 0 -1 -3

2 0 1 -2 -3

3 0 2 -3

4 0 3

superfícies

1 py 5

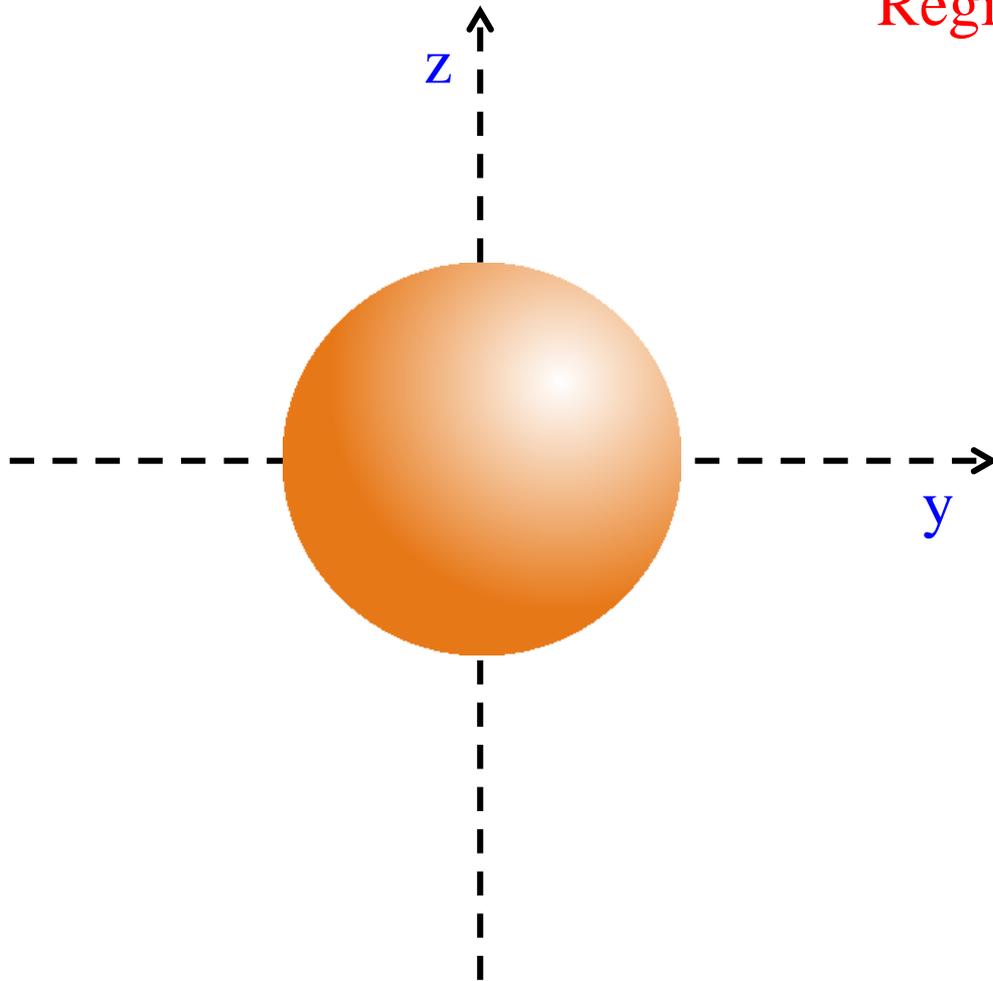
2 py 10

3 cy 2

Esfera

Região 1 – interior da esfera

Região 2 – fora do esfera



células

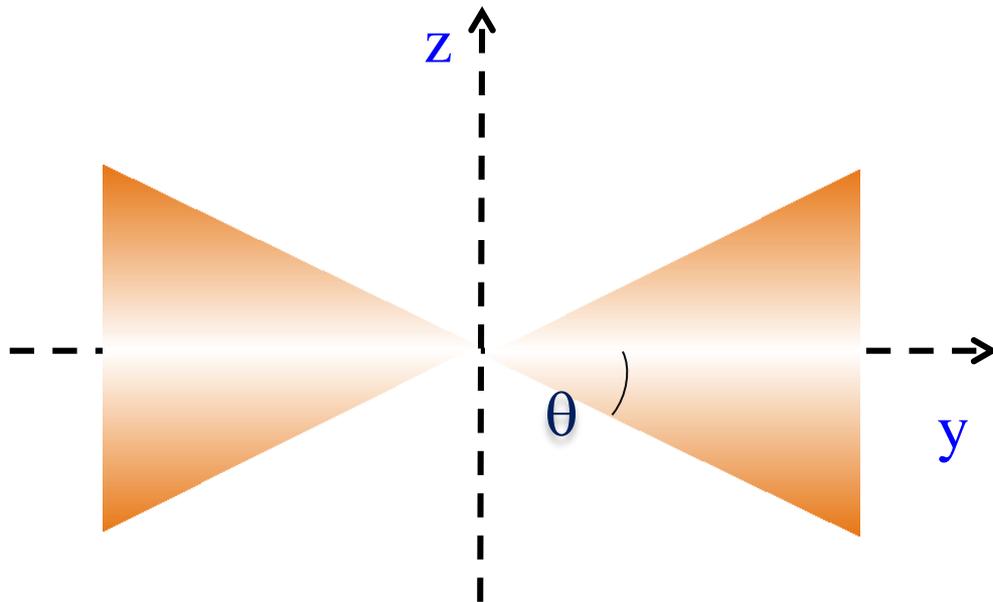
1 0 -1

2 0 1

superfícies

1 so 5

Cone



células

1 0 -1

2 0 1

superfícies

1 ky 0 0.0577 +1

2 ky 0 0.0577 -1

$(\tan \theta)^2$

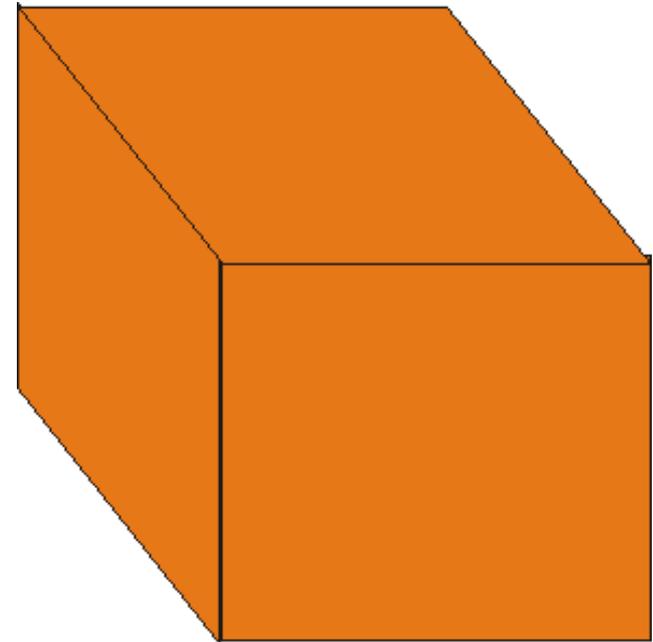
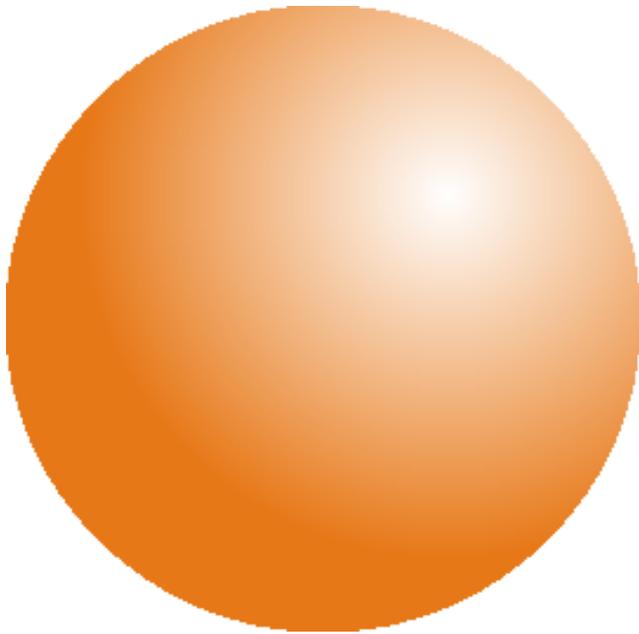
Atenção

- ▶ Todos se estendem ao infinito, com exceção da esfera;
- ▶ Célula exterior à região de interesse precisa ser definida;
- ▶ Partículas devem ser descartadas na célula exterior à região de interesse.

IMP – linha de importância

- ▶ IMP:N; IMP:P; IMP:E
- ▶ Linha é utilizada para especificar a importância relativa da região.
- ▶ Exemplo:
 - Em um caso de 4 regiões, sendo que a região 3 não é de interesse:
 - IMP:P 1 1 0 1
 - Os fótons nas regiões 1,2 e 4 serão seguidos enquanto que, ao entrar na região 3, será descartado.

Como definir a célula externa?



MODE

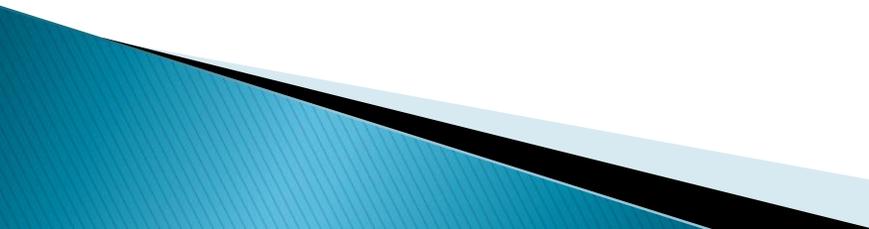
- ▶ `MODE x1 . . .xi`
- ▶ $x_i = N$ para transporte de nêutrons; P para transporte de fótons; E para transporte de elétrons.

- ▶ $N P$ – nêutrons e fótons induzidos por nêutrons;
- ▶ P – fótons apenas;
- ▶ E – elétrons apenas;
- ▶ $P E$ – fótons e elétrons;
- ▶ $N P E$ – nêutrons, fótons induzidos por nêutrons e elétrons.

- ▶ Default: `MODE N`

PHYS – Energy Physics – Nêutrons

- ▶ Form: PHYS:N EMAX EMCNF
 - ▶ EMAX = limite superior para a energia, MeV.
 - ▶ EMCNF = limite abaixo do qual nêutrons são tratados como captura análoga e acima da qual são tratados como captura implícita.

 - ▶ Default: EMAX = muito grande; EMCNF = 0.0 MeV.
 - ▶ Uso: Opcional.
- 

PHYS – Energy Physics – Fótons

- ▶ PHYS:P EMC PF IDES NOCOH
- ▶ EMC PF = limite superior (MeV).
- ▶ IDES
 - = 0 fótons produzirão elétrons em MODE E ou bremsstrahlung fótons.
 - = 1 fótons não produzirão elétrons.
- ▶ NOCOH
 - = 0 ocorrência de espalhamento Rayleigh.
 - = 1 sem ocorrência de espalhamento Rayleigh
- ▶ Default: EMC PF = 100 MeV; IDES = 0; NOCOH = 0.
- ▶ Uso: Opcional.

PHYS – Energy Physic – Elétrons

- ▶ PHYS:E EMAX IDES IPHOT
- ▶ EMAX = limite superior para elétrons (MeV).
- ▶ IDES
 - = 0 fótons produzirão elétrons;
 - = 1 não produzirão.
- ▶ IPHOT
 - = 0 elétrons produzirão fótons;
 - = 1 não produzirão.
- ▶ Defaults: EMAX = 100 MeV; IDES, IPHOT = 0
- ▶ Use: Opcional.

CUT – linha de corte

- ▶ CUT:n T E WC1 WC2 SWTM
- ▶ n
 - = N para nêutrons
 - = P for fótons
 - = E for elétrons
- ▶ T = temporizador em shakes, 1 shake=1E-8 seg
- ▶ E = limite inferior em MeV.
- ▶ WC1 and WC2 = atribuição de peso
- ▶ SWTM = peso mínimo para fonte
- ▶ Use: Optional, as needed.

SDEF – definição da fonte

- ▶ POS = x y z default 0 0 0;
- ▶ CEL = região inicial da partícula;
- ▶ ERG= energia inicial em MeV;
- ▶ PAR = tipo de partícula emitida pela fonte :
 - 1 para MODE:N ou N P ou N P E;
 - 2 para MODE:P ou P E
 - 3 para MODE:E.

- ▶ Exemplo:
 - `sdef pos=0 0 0 cel=1 erg=0.1 par=2`
 - `sdef pos=0 0 0 cel=1 erg=0.1 par=2 dir=1 vec=0 0 1`

M – especificação do material

- ▶ Mm ZAID1 fração1 ZAID2 fração2 . . .
 - m – número do material
 - ZAID – número de identificação do elemento ou nuclídeo;
 - fração - fração atômica ou fração por massa (se sinal negativo).

- ▶ ZAID → ZZZAAA.nnX
 - ZZZ – número atômico;
 - AAA – massa atômica, ignorado para fótons e elétrons;
 - nn – identificador da avaliação da seção de choque, branco ou zero para a avaliação default;
 - X – classe de dados :
 - Nêutrons: C – energia contínua; D – reação discreta; T – nêutrons térmicos; Y – dosimetria; M para multigrupos.
 - Fótons: P
 - Elétrons: E para elétrons;.

M – especificação do material

- ▶ Para elementos naturais AAA=000.
 - ZAID=74182 representa o isótopo ${}_{74}\text{W}^{182}$
 - ZAID=74000 representa o elemento tungstênio.
- ▶ Para fótons AAA=000 e nn.X podem ser omitidos.
- ▶ Fração:
 - Positivo: fração atômica;
 - Negativo: fração por massa.

Defina os materiais

			Z	A
▶ H2O			H 1	1
			O 8	16
▶ Ar	N2	70%	7	14
	O2	30%		

F – saída de dados

<u>Mnemonic</u>	<u>Tally Description</u>	<u>Fn units</u>	<u>*Fn units</u>
F1:N or F1:P or F1:E	Current integrated over a surface	particles	MeV
F2:N or F2:P or F2:E	Flux averaged over a surface	particles/cm ²	MeV/cm ²
F4:N or F4:P or F4:E	Flux averaged over a cell	particles/cm ²	MeV/cm ²
F5a:N or F5a:P	Flux at a point or ring detector	particles/cm ²	MeV/cm ²
F6:N or F6:N,P or F6:P	Energy deposition averaged over a cell	MeV/g	jerks/g
F7:N	Fission energy deposition averaged over a cell	MeV/g	ierks/g
F8:P or F8:E or F8:P,E or +F8:E	Energy distribution of pulses created in a detector Charge deposition	pulses charge	MeV

1 jerk = 10⁹ Joules

F – saída de dados

Exemplo : f8:p,e 2

onde 2 é a região de interesse

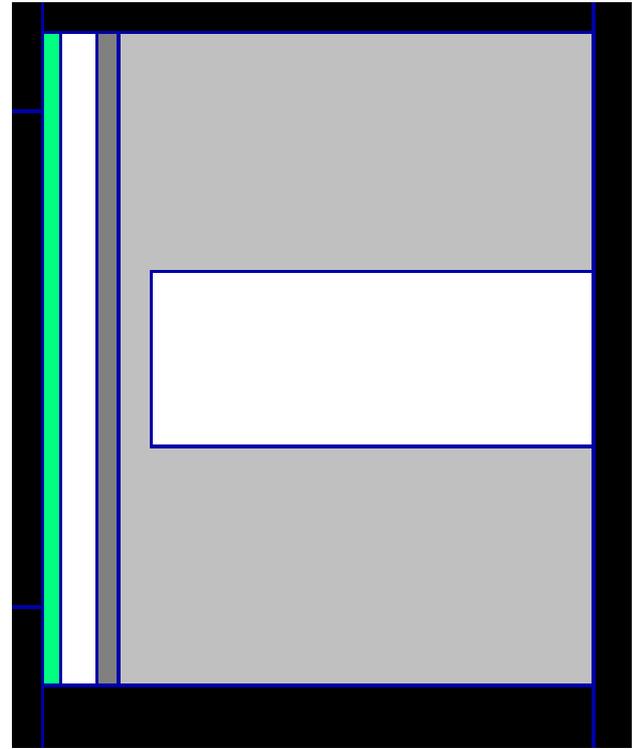
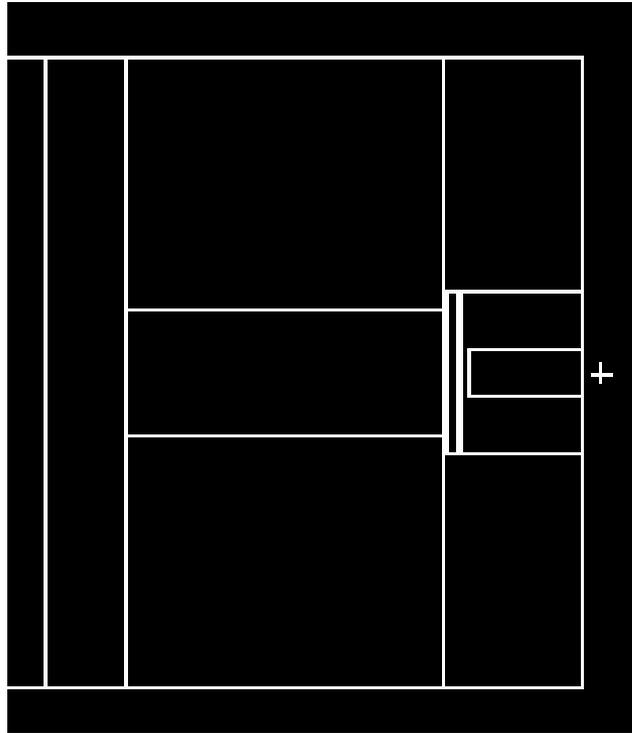
E – seleção das energia para saída de dados

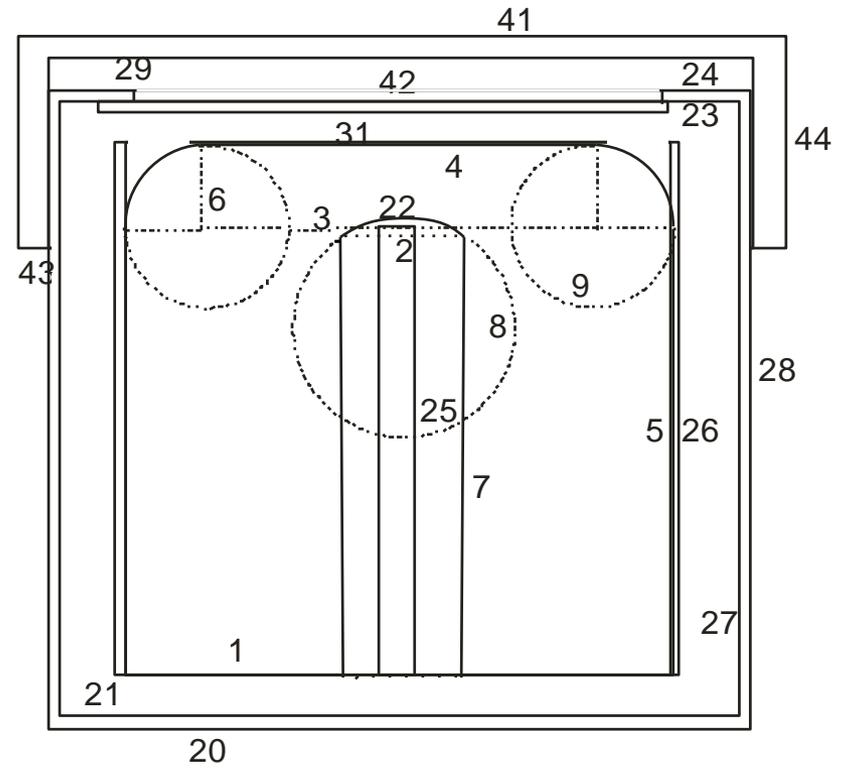
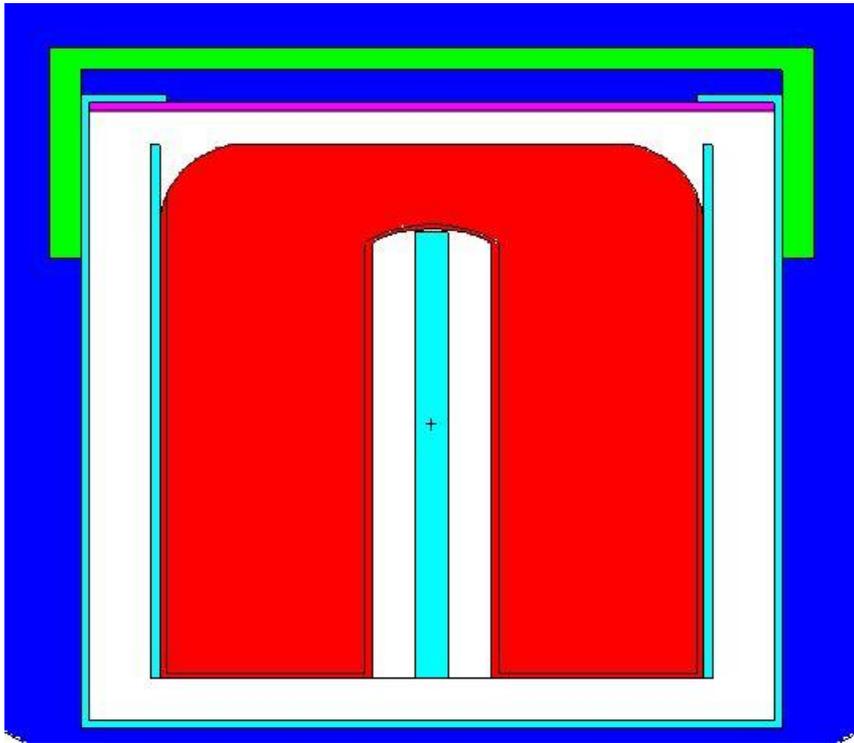
- ▶ En E1 . . . Ek
- ▶ n = número do tally;
- ▶ Ei = limites das faixas de energia.

- ▶ Exemplo1: E8 .1 1 20
- ▶ Separa em 4 faixas de energia:
- ▶ (1) da energia de corte até 0.1 MeV;
- ▶ (2) de 0.1 até 1.0 MeV;
- ▶ (3) de 1.0 até 20.0MeV;
- ▶ (4) total.

- ▶ Exemplo 2: E8 0 0.0001 598i 0.06

Exemplos





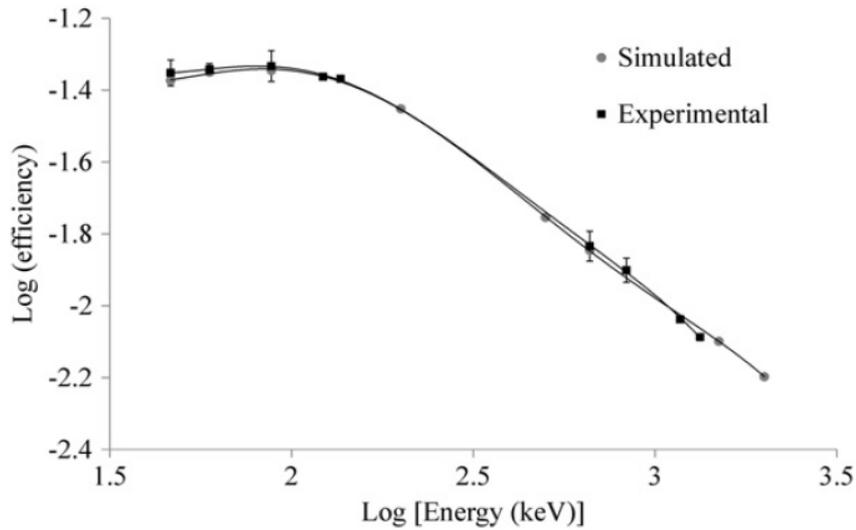


Fig. 6. Experimental and simulated pot geometry efficiency curves for a 45% HPGe detector.

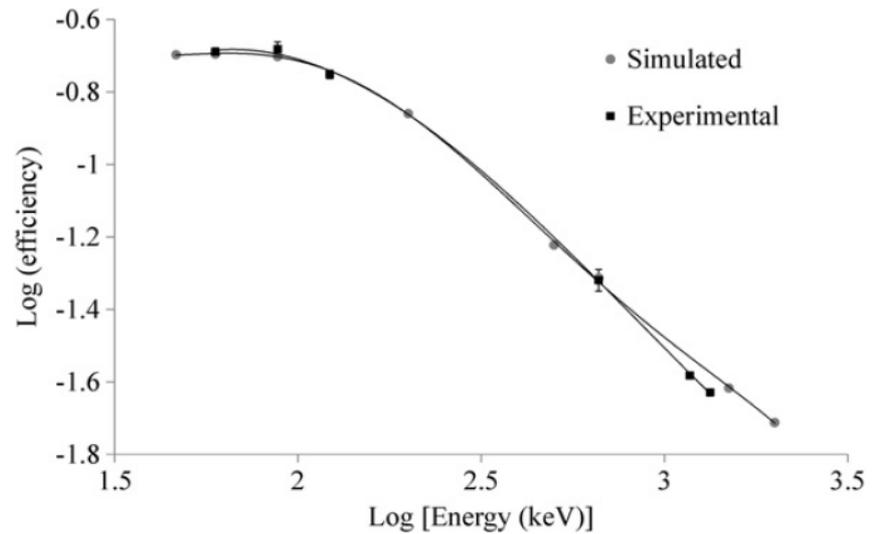


Fig. 5. Experimental and simulated filter geometry efficiency curves for a 45% HPGe detector.

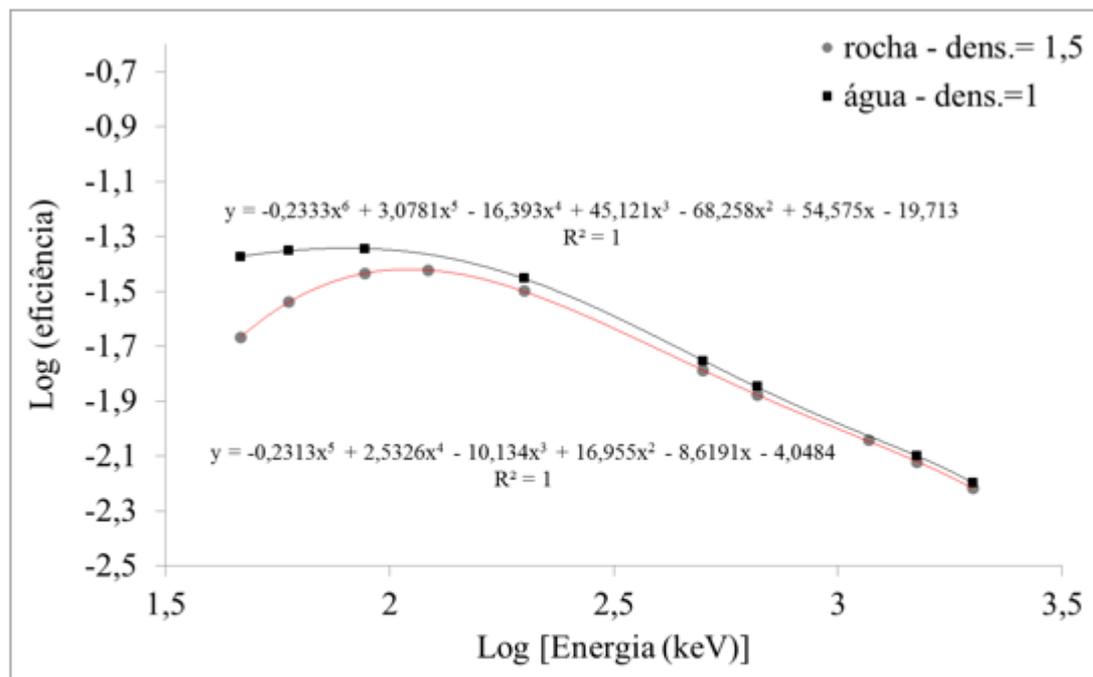
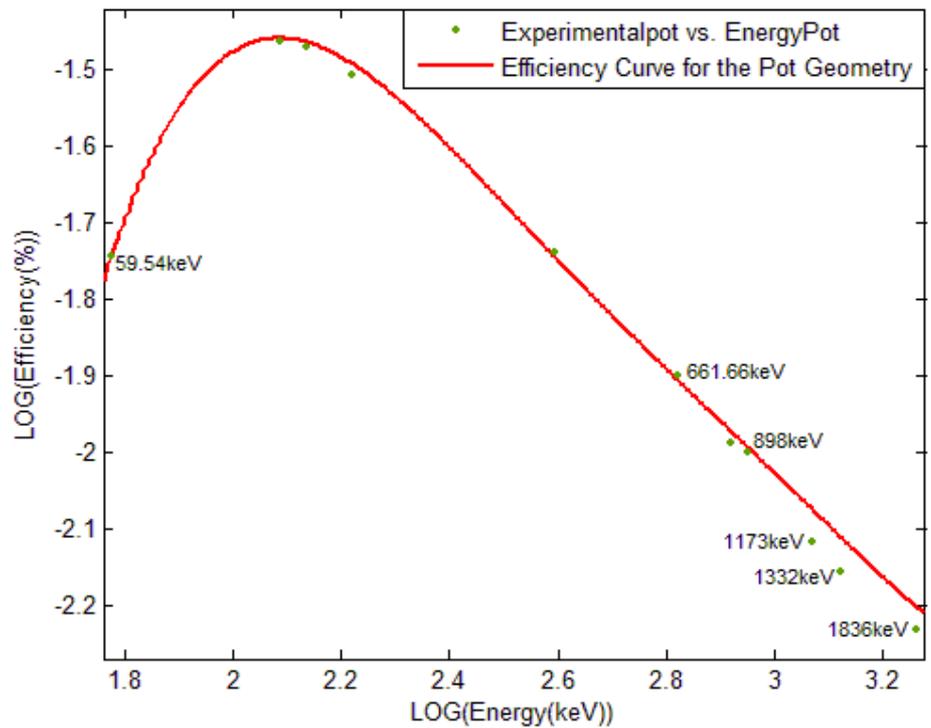
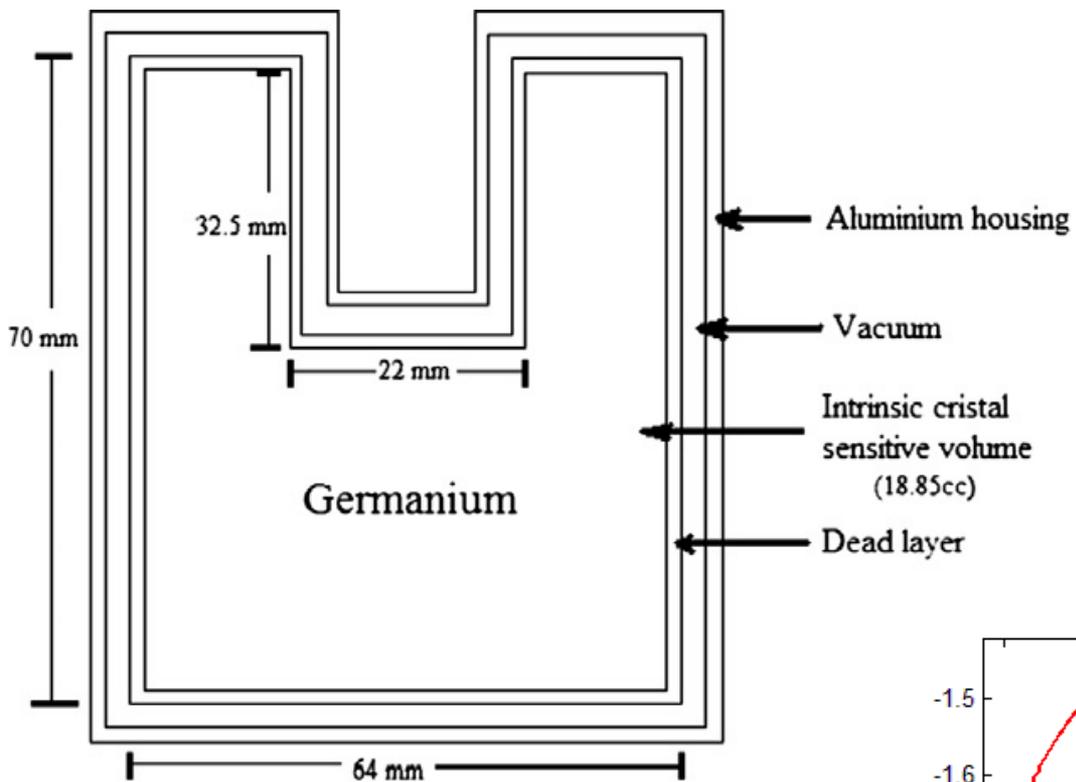


Figura 9 Comparação das curvas de eficiência para meio aquoso e para composição química de granito com massa específica de $1,5 \text{ g/cm}^3$ determinadas pelo método de Monte Carlo.



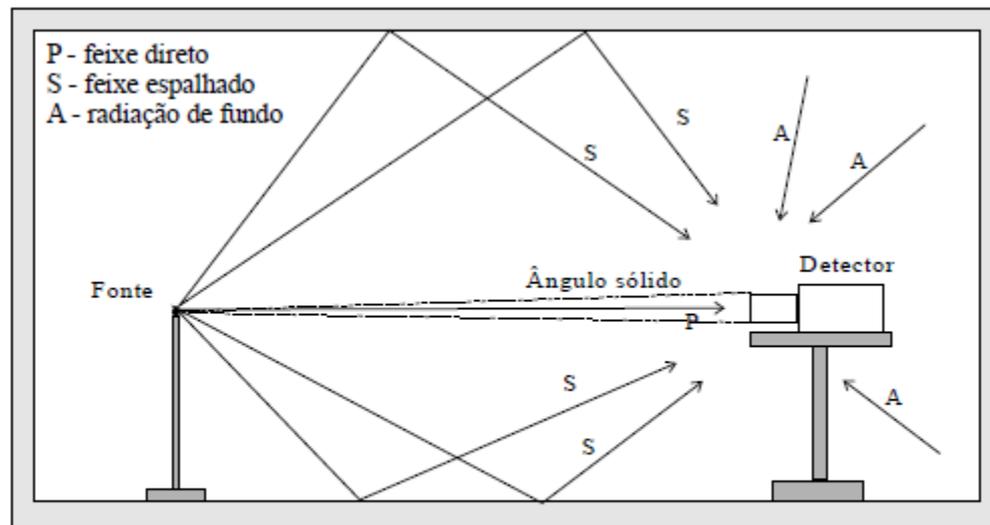


Figura 3.3 - Representação esquemática do arranjo para determinação da eficiência e fatores de forma. P - feixe direto, S - feixe espalhado e A - radiação de fundo.

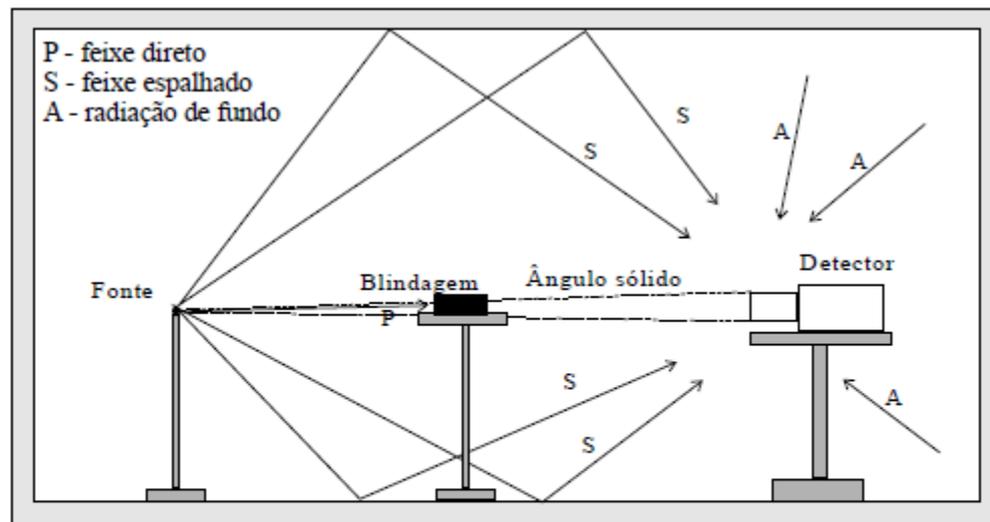


Figura 3.4 - Representação esquemática do arranjo para determinação da eficiência e fatores de forma com a blindagem de sombra posicionada. P - feixe direto, S - feixe espalhado e A - radiação de fundo.

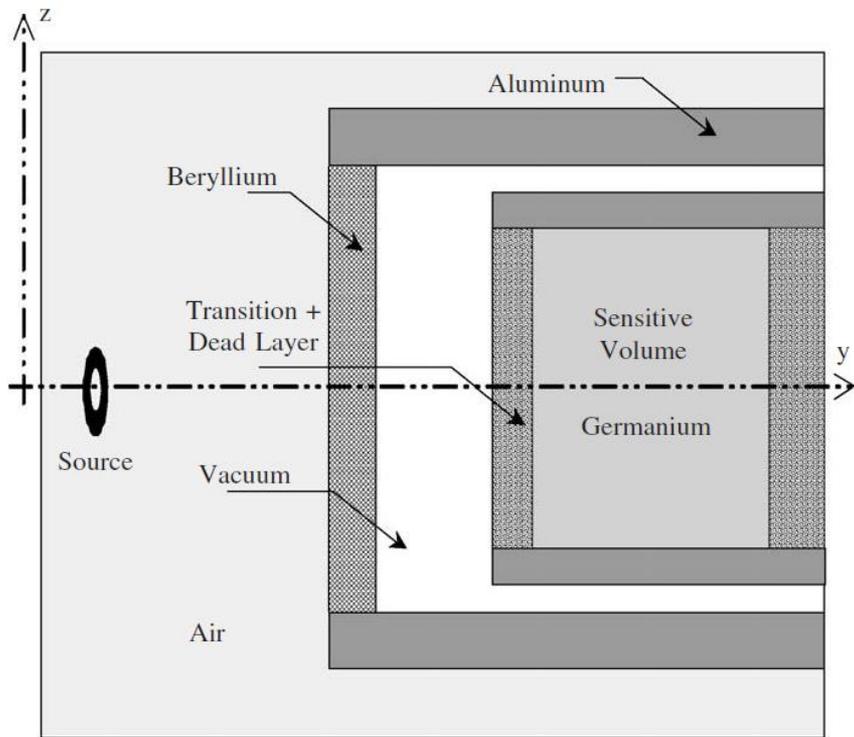


Fig. 2. Schematic representation of the planar HPGe detector; the different regions and materials considered in the simulation are shown.

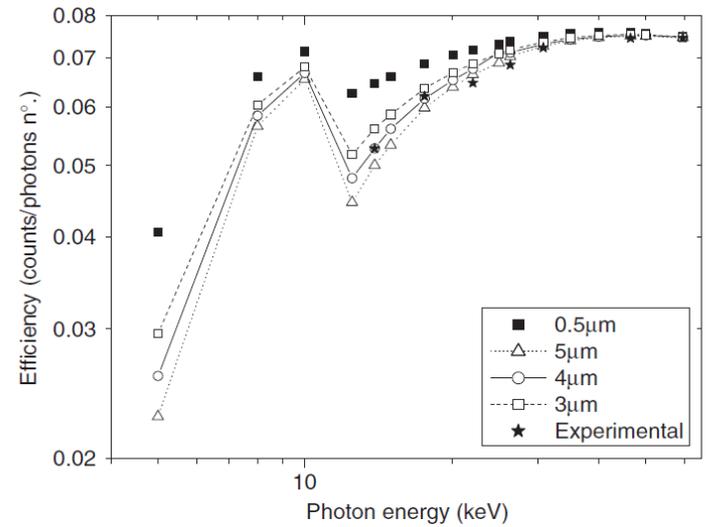


Fig. 3. Simulated and experimental efficiency curves for several values of thickness of dead plus transition layers.

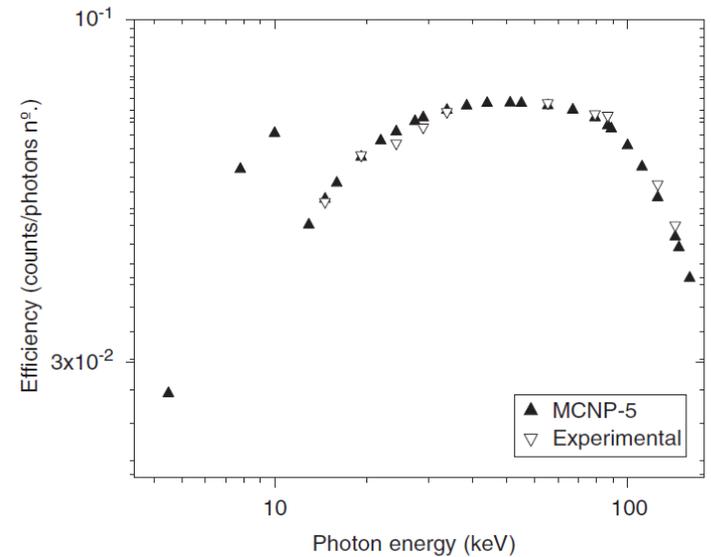
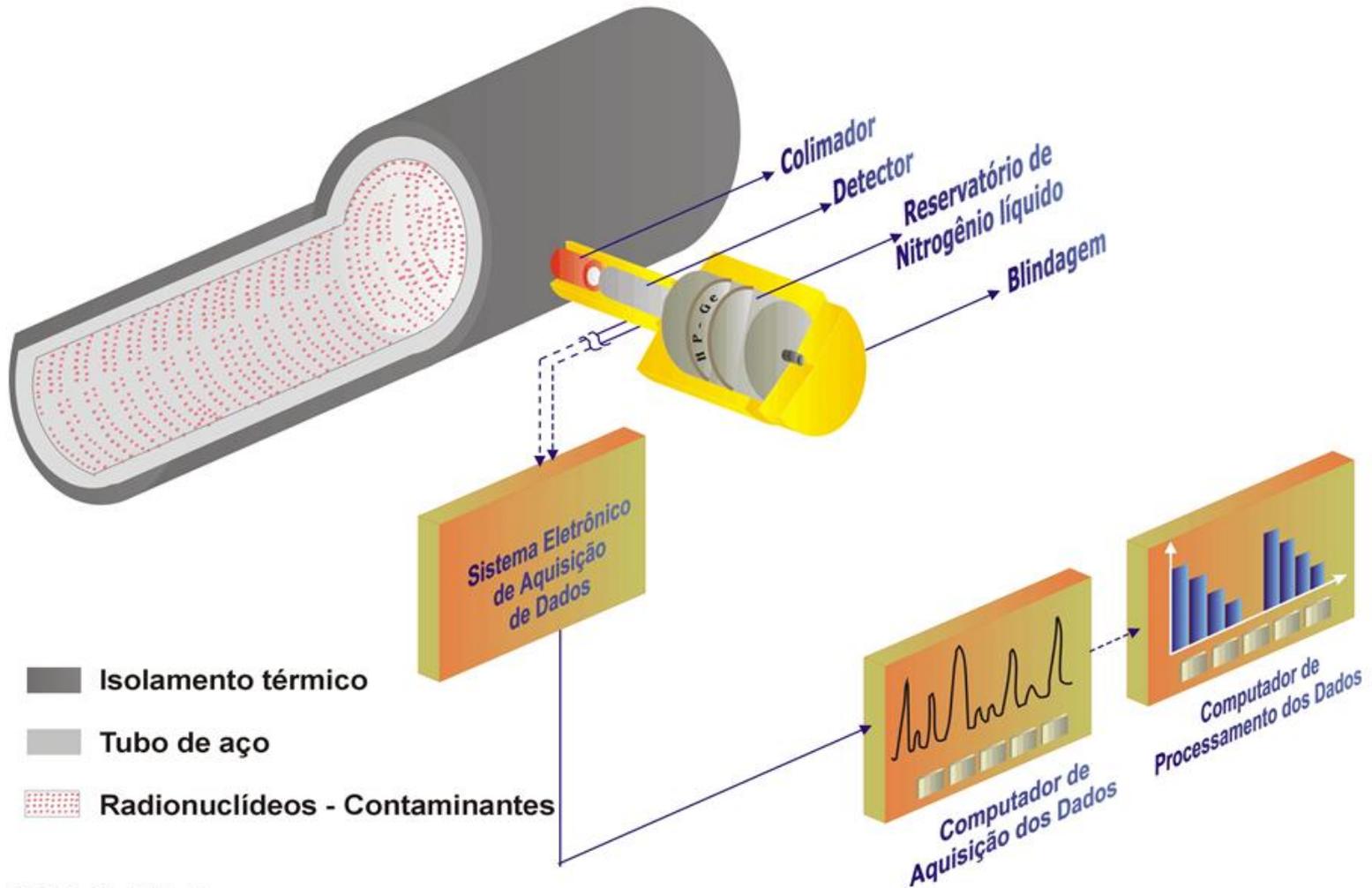
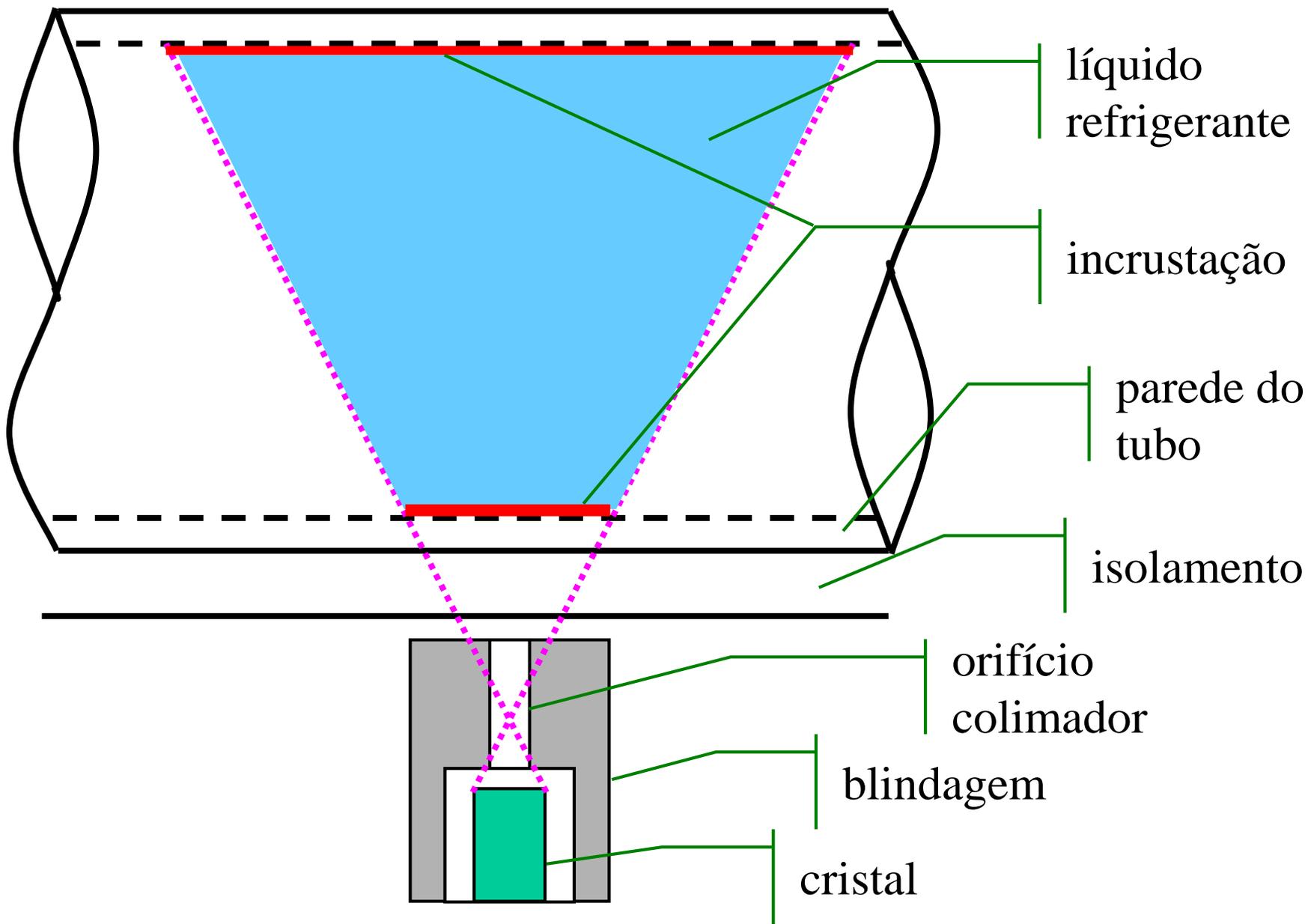


Fig. 4. Planar HPGe detector's efficiency curves obtained both by simulation and experiment for radioactive sources at 10cm distance.

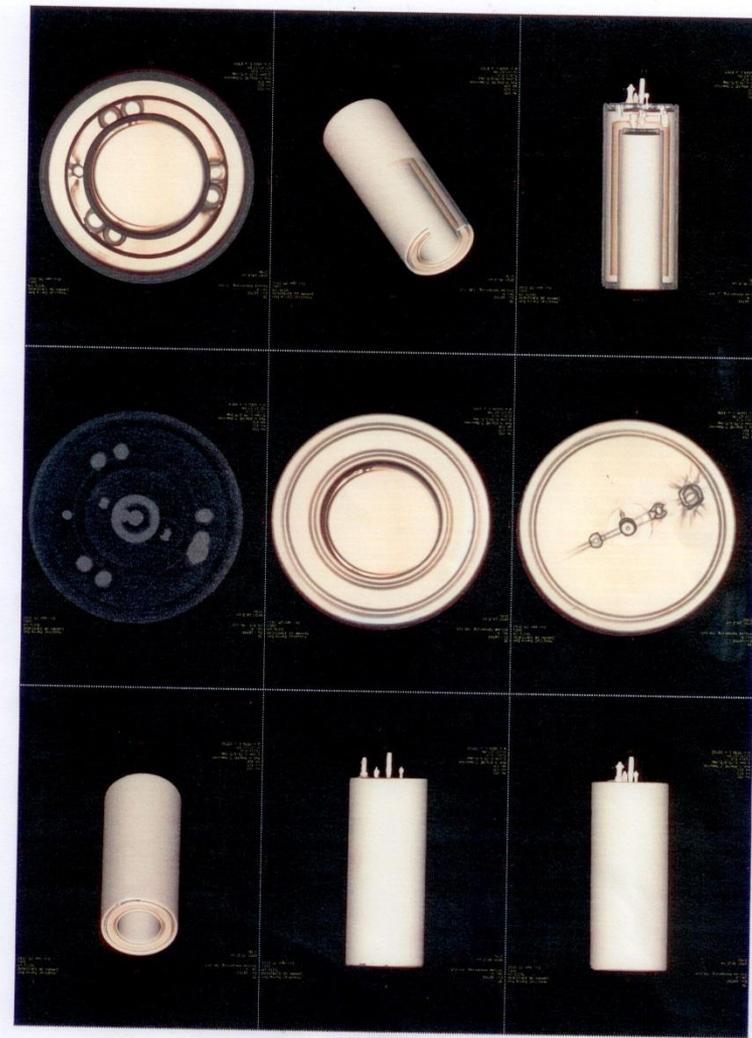
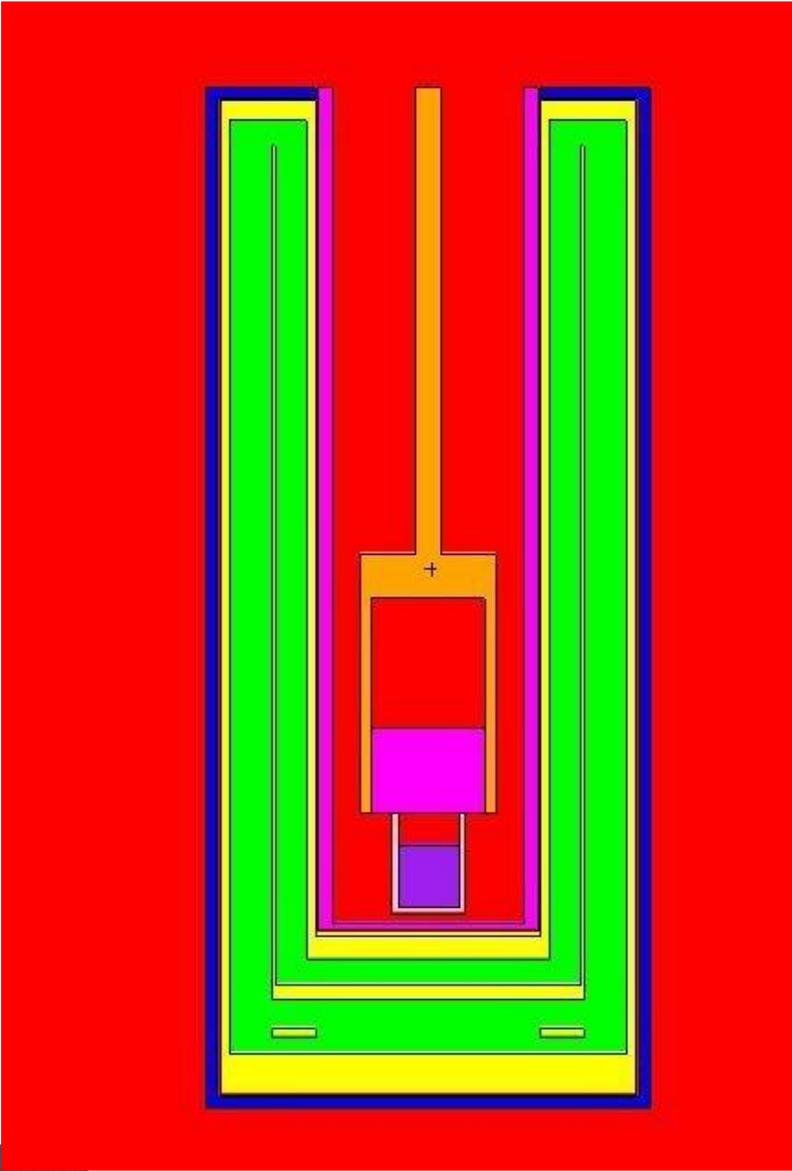
Figura 1. Sistema de Aquisição de Dados

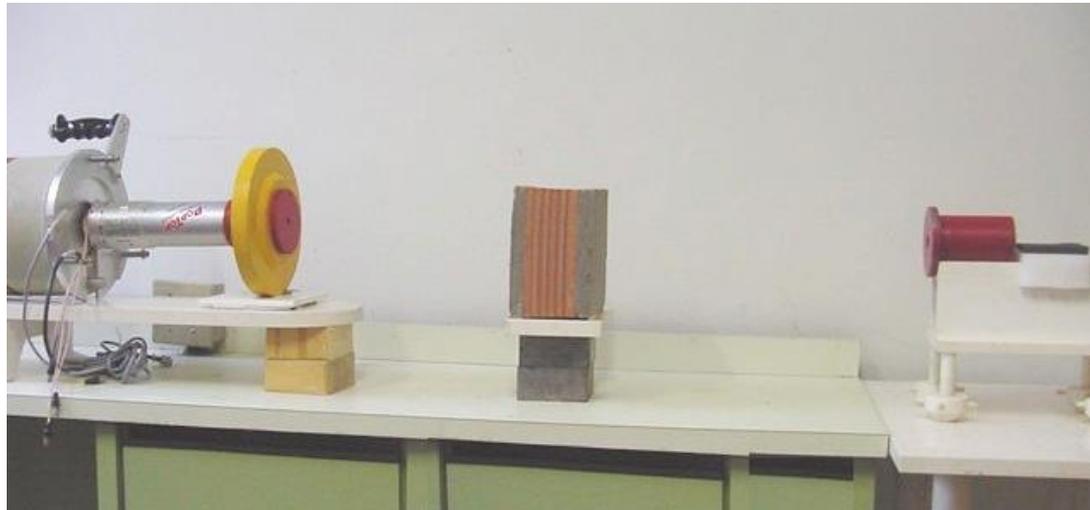




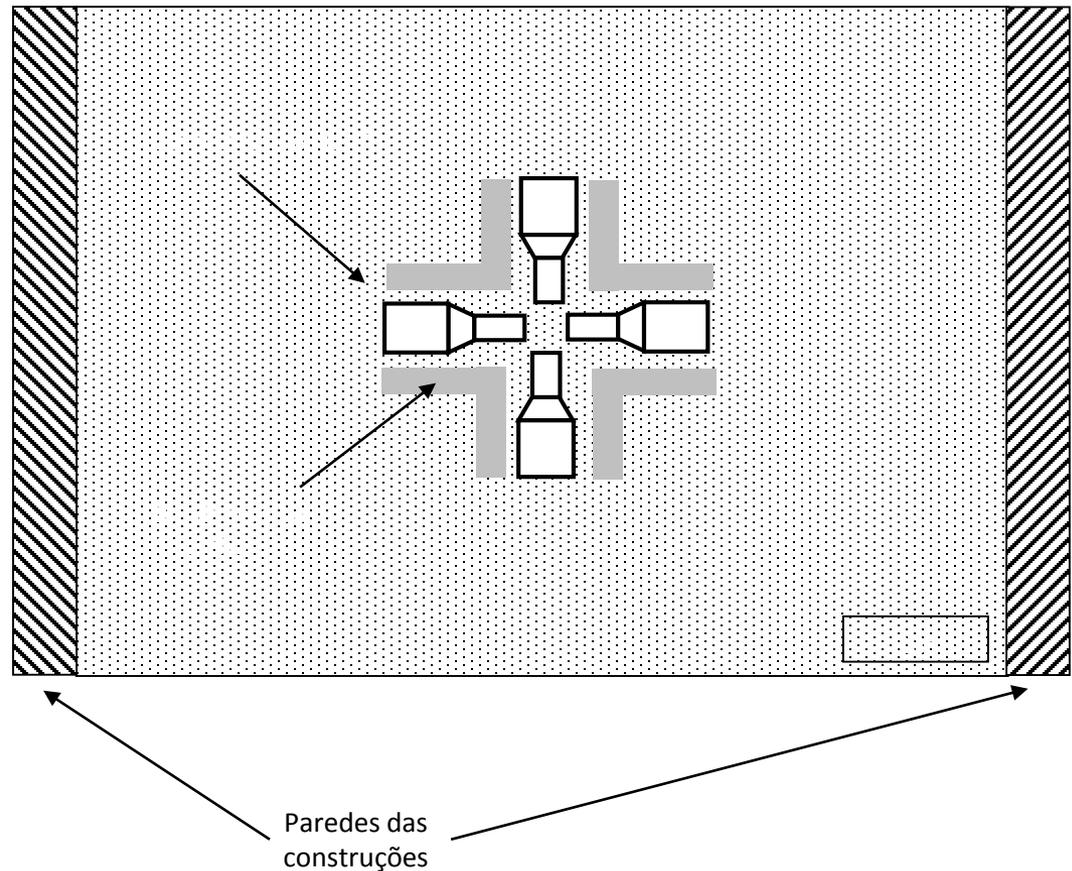


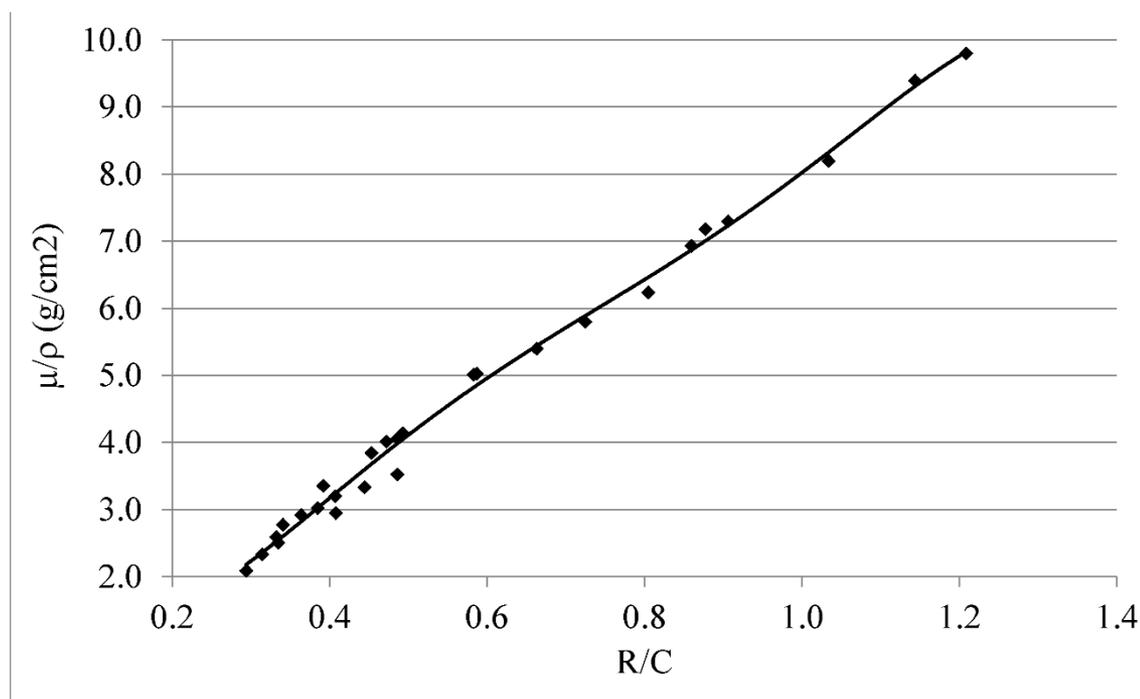
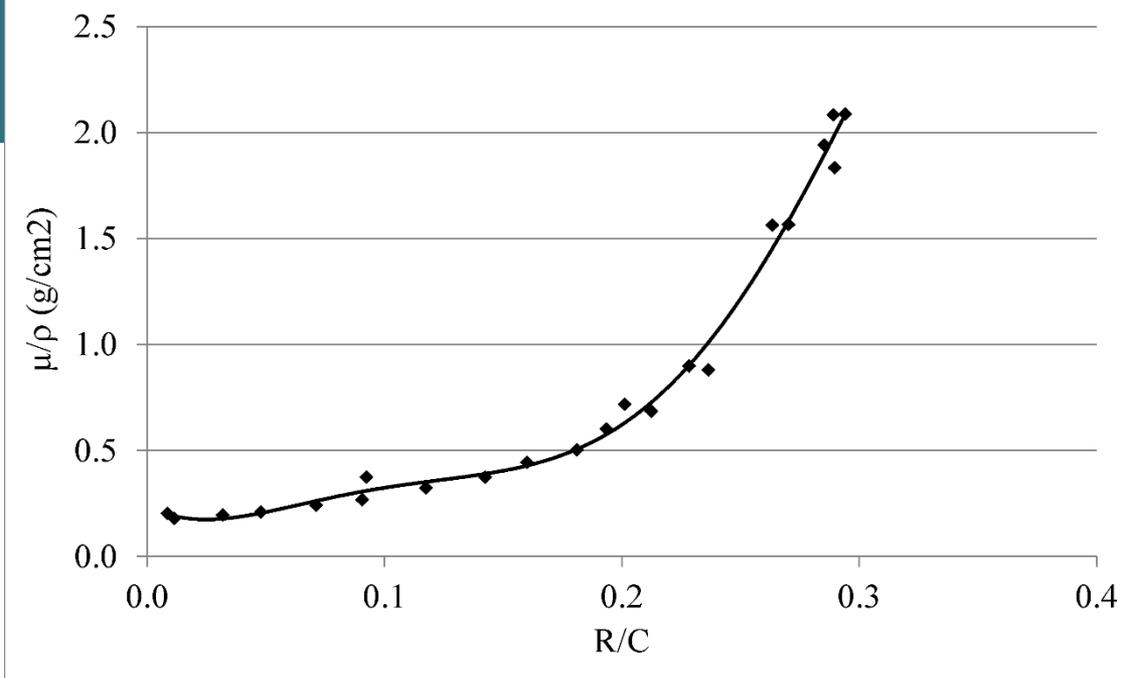


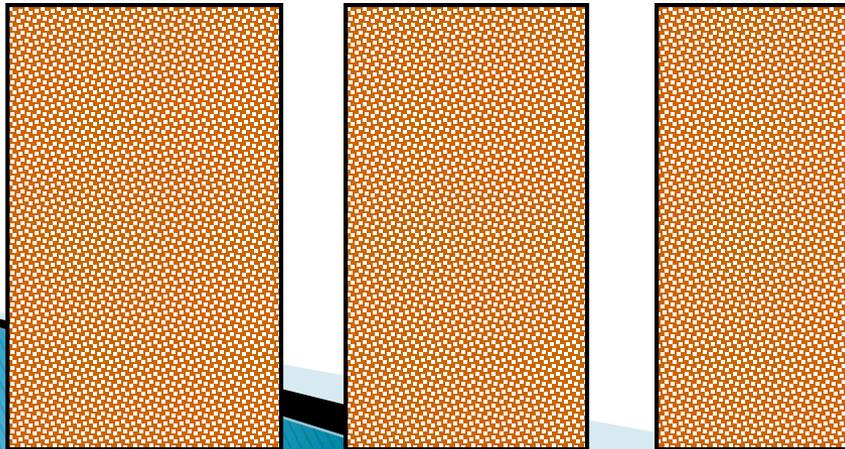




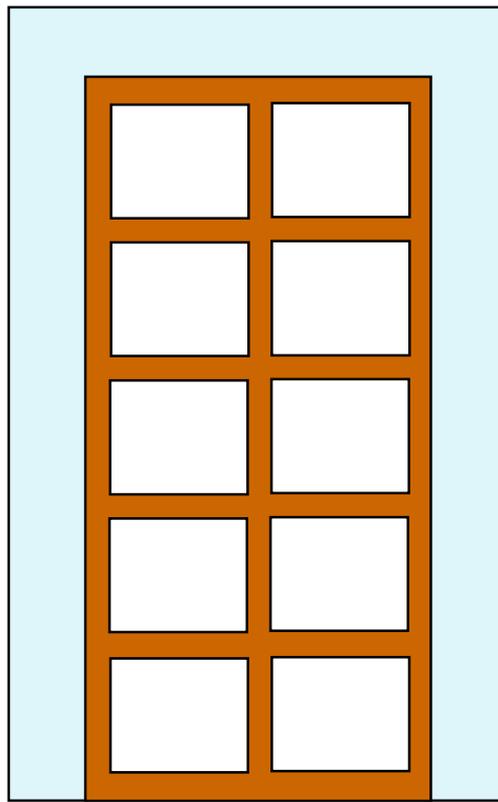
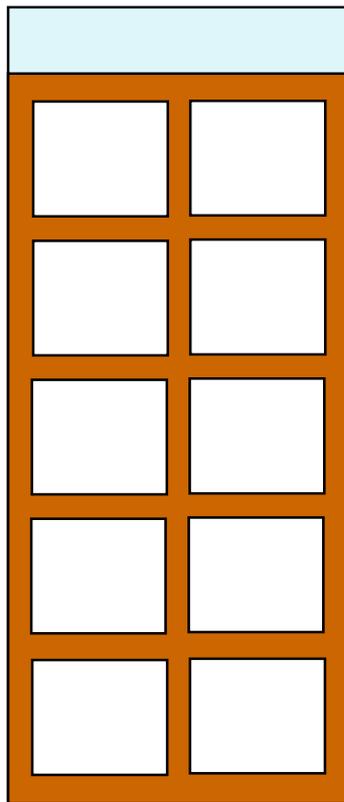
- Geometria computacional
 - 4 detectores de NaI(Tl) de 3" x 3"
 - Arranjo em forma de cruz
 - Blindagem cilíndrica de 5 cm de espessura





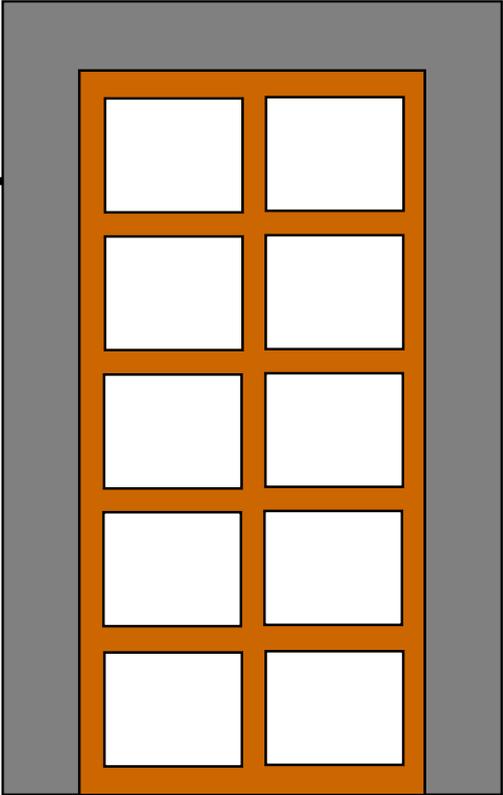
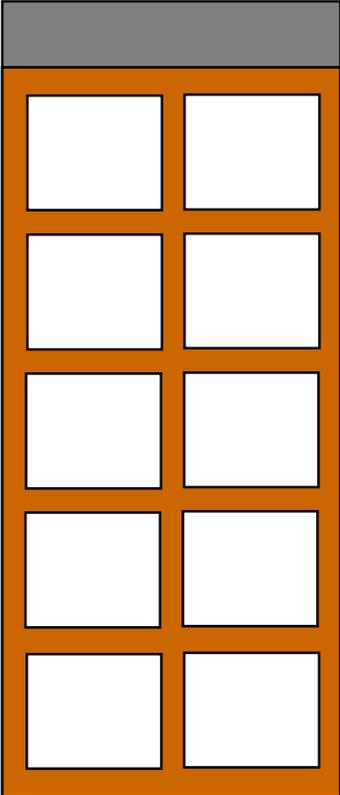


As diferentes camadas foram misturadas e trabalhou-se com uma região apenas.



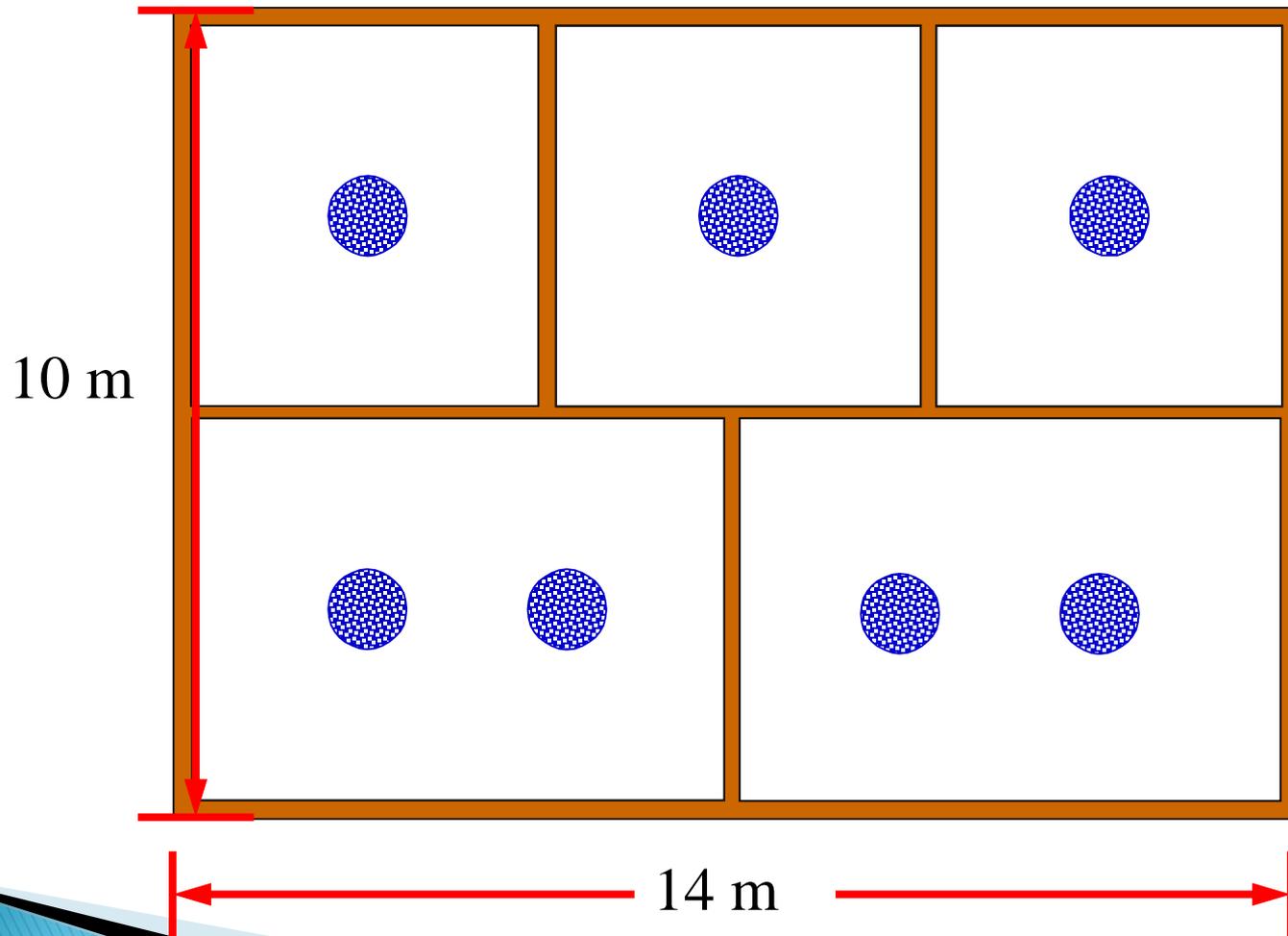
Etapa 2 - Validação do modelo simplificado para o tijolo

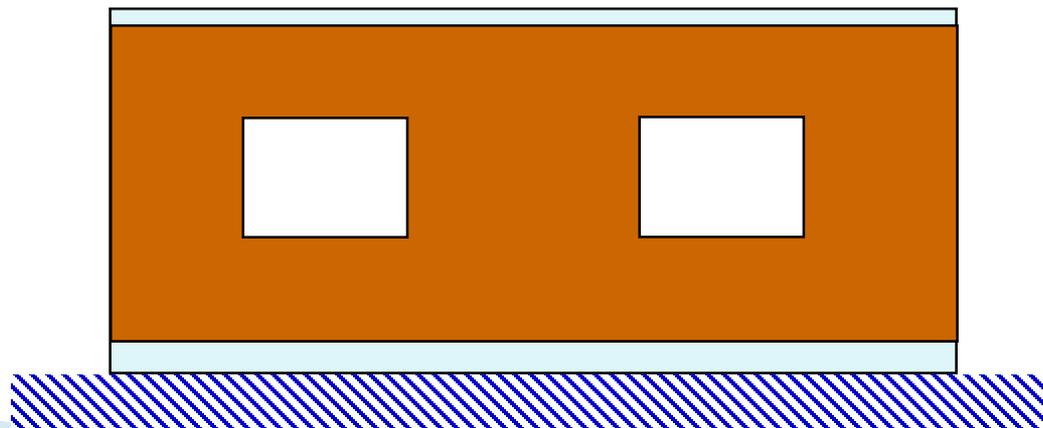
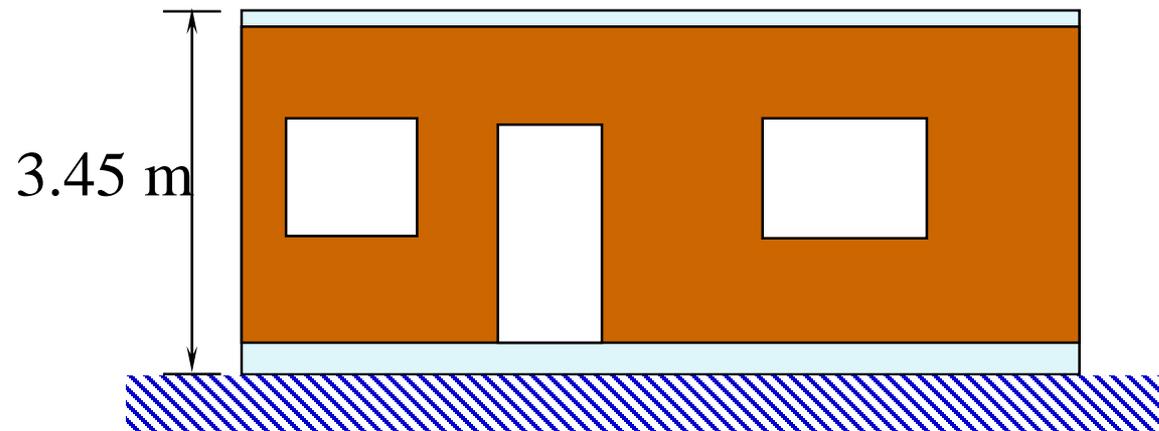
Diferença no fluxo gama transmitido pela comparação dos modelos completo e o simplificado.

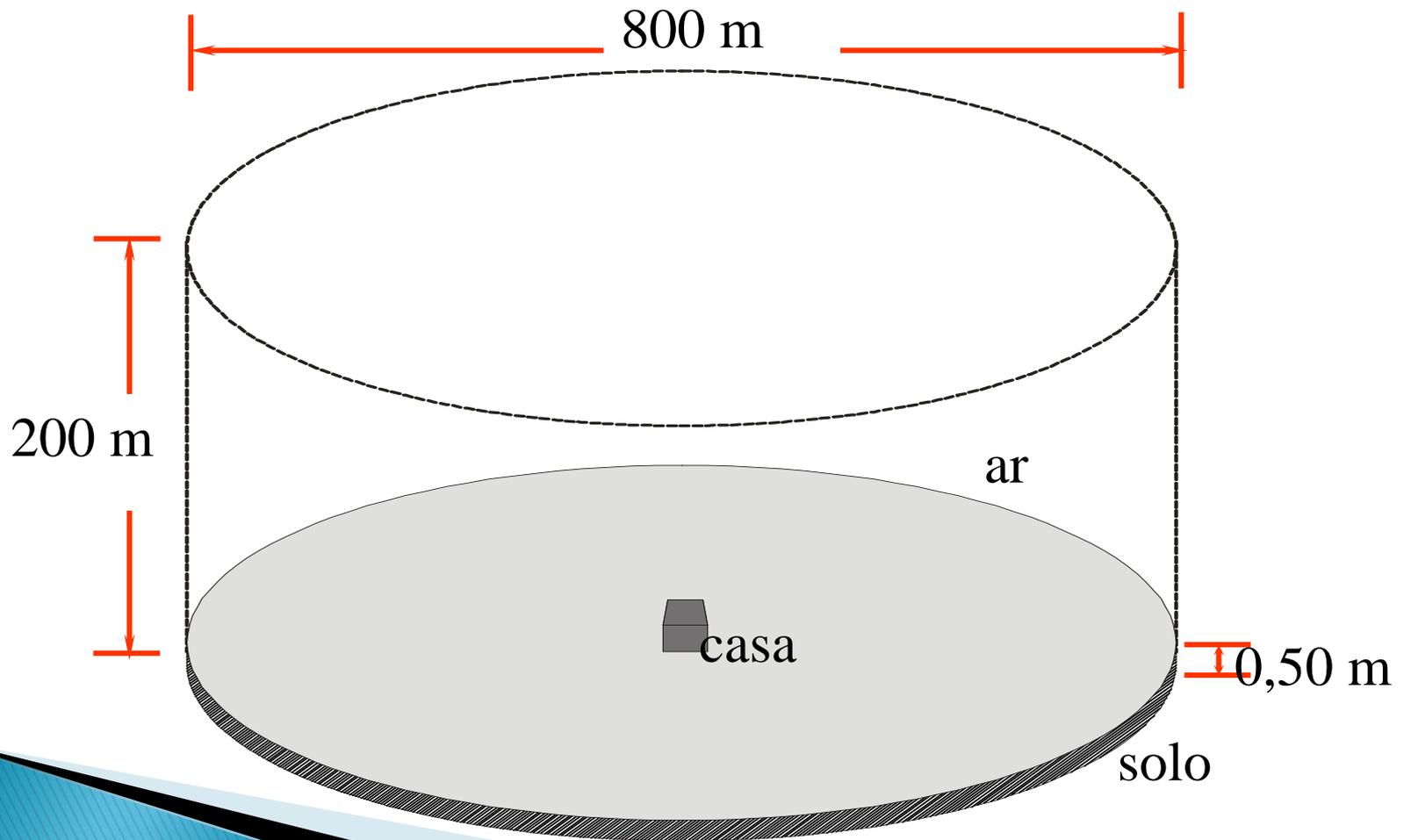


Energia (keV)	Tijolo TJ (%)	Tijolo T2L (%)
300	1,2	1,8
662	-1,5	0,8
3000	-1,7	-1,4

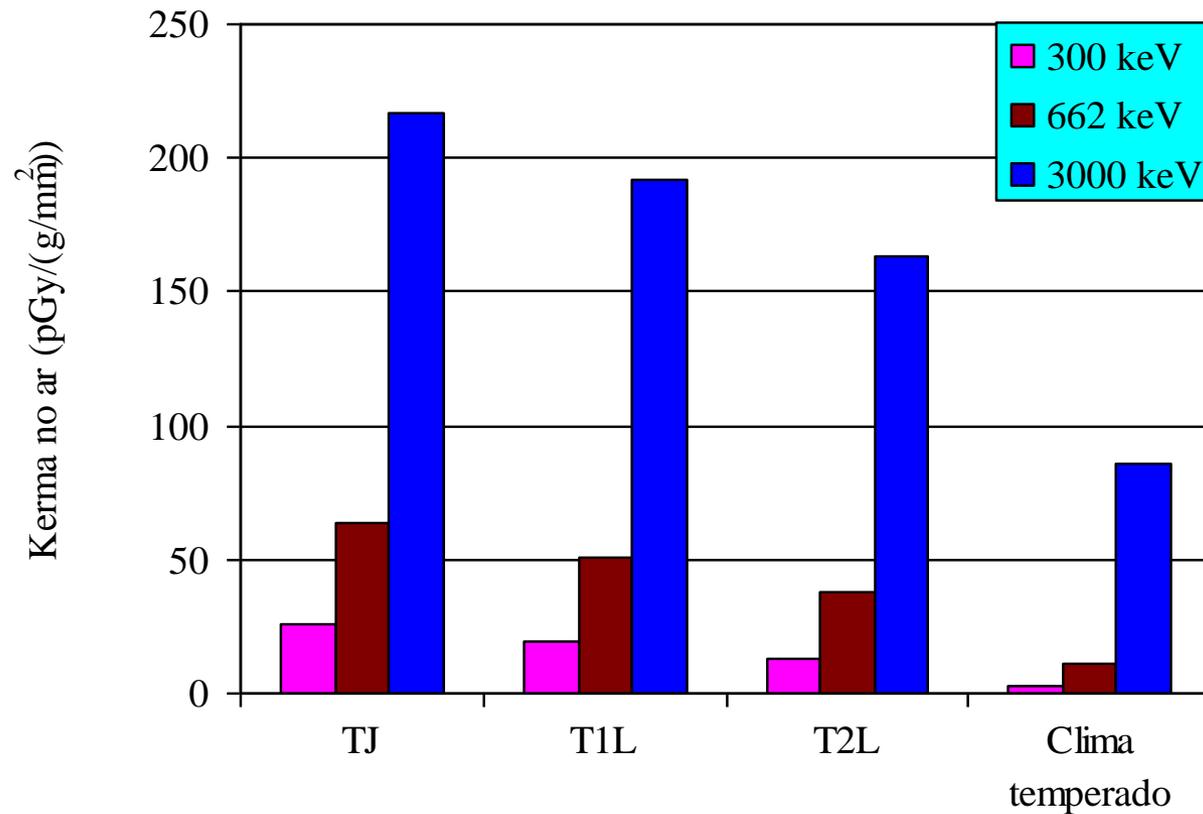
Residência 1







Clima Tropical X Clima Temperado



FIM