

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

ELABORAÇÃO DE UM CRITÉRIO PARA IDENTIFICAR NÊUTRONS EM REGIME  
RECORRENTE E TRANSIENTE EM SIMULAÇÕES MONTE CARLO DE REATORES  
NUCLEARES

por

Luiz Felipe Fracasso Chaves Barcellos

Monografia apresentada ao  
Departamento de Engenharia Mecânica  
da Escola de Engenharia da  
Universidade Federal do Rio Grande do  
Sul, como parte dos requisitos para  
obtenção do diploma de Engenheiro  
Mecânico.

Porto Alegre, Dezembro de 2012

ELABORAÇÃO DE UM CRITÉRIO PARA IDENTIFICAR NÊUTRONS EM REGIME  
RECORRENTE E TRANSIENTE EM SIMULAÇÕES MONTE CARLO DE REATORES  
NUCLEARES

por

Luiz Felipe Fracasso Chaves Barcellos

ESTA MONOGRAFIA FOI JULGADA ADEQUADA COMO PARTE DOS  
REQUISITOS PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
**ENGENHEIRO MECÂNICO**  
APROVADA EM SUA FORMA FINAL PELA BANCA EXAMINADORA DO  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

Prof.Dr. Arnaldo Ruben Gonzales

Coordenador do Curso de Engenharia

Mecânica

Área de Concentração: **Ciências Térmicas**

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Bodmann

Comissão de Avaliação:

Prof. Nome 1

Prof. Nome 2

Prof. Nome 3

Porto Alegre, 09 de Dezembro de 2012

## AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor Dr. Bardo E. J. Bodmann pelo incentivo e pelos ensinamentos passados, além do fato de ser um exemplo profissional.

Agradeço também à Dra. Dayana Queiroz de Camargo pelo tempo e ajuda dispensada sempre que necessários e por fornecer seu software, sem o qual este trabalho não teria sido possível. Este agradecimento também se estende para o colega de curso HerberthBirckFröhlich, que também se mostrou bastante solícito, me ajudando a melhor entender linguagem C++.

Também são indispensáveis os agradecimentos aos colegas que ingressaram no curso junto comigo em 2008/1, por todas as coisas compartilhadas, sejam elas apoio, ensinamento ou risadas. Agradeço neste trabalho especialmente ao colega Felipe G. Ben, que, além de compartilhar comigo o interesse pelo munda nuclear, sempre dividiu seu vasto conhecimento com os demais e sempre ofereceu discussões de alto nível.

Agradeço também aos amigos fora da engenharia mecânica, cuja amizade me é extremamente importante. Faço um agradecimento especial à minha amiga e instrutora Nydia K. Detemple, por me ajudar a manter a sanidade mental durante a criação deste trabalho.

Agradeço também a Gandalf, pelos sábios conselhos dispensados, pois até mesmo um personagem fictício tem algo a nos ensinar.

Por fim, agradeço à minha família, principalmente meu pai e minha mãe, que sempre me apoiaram em todas as coisas, sempre confiaram em mim e sempre forneceram amparo e conselhos quando necessário.

Obrigado a todos.

CHAVES BARCELLOS, L.F.F. **Elaboração de um critério para identificar nêutrons em regime recorrente e transiente em simulações Monte Carlo de reatores nucleares.** 2012. 20 folhas. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

## RESUMO

Este trabalho visa propor um critério para a simulação de *up-scattering* via tratamento estatístico de uma população de nêutrons existente em um reator nuclear hipotético. Para a obtenção dos dados de tal população de nêutrons é utilizado um programa que se utiliza do método de Monte Carlo e realiza o cálculo com dependência contínua de energia. Este trabalho define regimes recorrente e transiente, podendo os nêutrons encontrar-se em um ou outro. Tais regimes são utilizados para definir como o tratamento estatístico mencionado pode ser efetuado e como o *up-scattering* pode ser simulado.

**PALAVRAS-CHAVE:** simulação *up-scattering*, regime transiente, regime recorrente, reator nuclear, método de Monte Carlo.

CHAVES BARCELLOS, L.F.F. **Development of a criterion to identify recurrent and transient regime neutrons in Monte Carlo simulations of nuclear reactors.** 2012. 20 sheets. Monografia (Trabalho de Conclusão do Curso em Engenharia Mecânica) – Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

## ABSTRACT

This paper aims to propose a criterion to simulate *up-scattering* via a statistical treatment of the neutron population that exists in a hypothetical reactor. In order to obtain the data of such neutron population, a software that implements the Monte Carlo method and continual energy dependence is used. This paper defines the recurrent and transient regimes, so that neutrons can be part of one or the other. These regimes are used to define how the aforementioned statistical treatment can be performed and how the *up-scattering* can be simulated.

**KEYWORDS:** *up-scattering* simulation, transient regime, recurrent regime, nuclear reactor, Monte Carlo method.

## ÍNDICE

<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	<b>1</b>
<b>2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	<b>1</b>
<b>3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b> .....	<b>1</b>
3.1. SEÇÃO DE CHOQUE.....	2
3.2. FLUXO DE NÊUTRONS E TAXA DE REAÇÃO.....	2
3.3. ESPALHAMENTOS.....	2
3.4. DISTRIBUIÇÃO DE MAXWELL-BOLTZMANN.....	3
<b>4. O PROGRAMA <i>CONTINUOUS</i> E O MÉTODO DE MONTE CARLO</b> .....	<b>4</b>
4.1. DESCRIÇÃO DO PROGRAMA <i>CONTINUOUS</i> .....	4
4.2. ALTERAÇÕES REALIZADAS NO PROGRAMA .....	6
<b>5. PROBLEMÁTICA DE <i>UP-SCATTERING</i> E <i>DOWN-SCATTERING</i></b> .....	<b>6</b>
5.1. RELAÇÃO ENTRE DISTRIBUIÇÕES TRANSIENTES E RECORRENTES.....	7
<b>6. METODOLOGIA PROPOSTA</b> .....	<b>9</b>
<b>7. RESULTADOS</b> .....	<b>10</b>
<b>8. CONCLUSÕES</b> .....	<b>13</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	<b>14</b>
<b>APÊNDICES</b> .....	<b>15</b>
I. DEFINIÇÃO DO TEMPO MONTE CARLO .....	15

## 1. INTRODUÇÃO

No projeto e na operação de reatores nucleares são utilizados programas computacionais que simulam o comportamento dos nêutrons em um reator. Sabe-se que os nêutrons podem ganhar ou perder energia ao interagirem com os átomos presentes no reator. Simular o ganho de energia do nêutron em um choque é bastante complexo, o que faz com que isso seja desconsiderado em alguns programas, ou faz com que o tempo de processamento seja muito elevado quando considerado.

Este trabalho propõe uma metodologia para simular o ganho energético de maneira probabilística, sem incorrer em cálculos mais complexos, visando assim reduzir os tempos de processamento. Para isso se define dois tipos de regime, o regime recorrente e o transiente, a que os nêutrons podem pertencer, e tanto o número de nêutrons em cada regime quanto suas energias são definidos a partir de cálculos estatísticos. Além disso, também é proposto neste trabalho o tratamento diferenciado que deve ser dado aos nêutrons do regime recorrente e do regime transiente.

Para o desenvolvimento deste trabalho foi utilizado o programa *Continuous* [Camargo, 2011]. Este programa simula a população de nêutrons em um reator via método de Monte Carlo. Ao contrário dos programas convencionais, que realizam os cálculos via grupos de energia, o programa *Continuous* utiliza curvas parametrizadas em função da energia para as seções de choque, de forma que o cálculo efetuado apresenta dependência contínua de energia [Camargo, 2011].

São descritas neste trabalho alterações realizadas no programa *Continuous*. Tais alterações foram necessárias para facilitar a obtenção e o posterior tratamento dos dados de saída do programa.

Ao final do trabalho são apresentados resultados que relacionam os nêutrons em regime recorrente e a população total de nêutrons. Com base nesses dados argumenta-se como o tratamento diferenciado dos nêutrons em regime transiente e recorrente é capaz de simular o ganho de energia nas colisões.

## 2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Autores a exemplo de [Turner, 2007] utilizam o fato de que nêutrons podem se encontrar em equilíbrio térmico com o meio e, desta forma, obedecem à distribuição de Maxwell-Boltzmann, isso é utilizado para definir um limiar energético para a definição de um nêutron térmico. Tal limiar não é utilizado neste trabalho, definindo-se um regime recorrente para os nêutrons em equilíbrio térmico, no qual a distribuição de Maxwell-Boltzmann é válida.

O presente trabalho difere de grande parte dos trabalhos existentes na área por trabalhar com um programa que apresenta dependência contínua de energia, não se utilizando de grupos de energia. Este trabalho é focado em uma proposta de simulação de *up-scattering* a ser implementada no programa utilizado.

## 3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

De acordo com [Reuss, 2008; Sekimoto, 2007; Zweifel, 1973] é feita uma breve revisão de conceitos.

### 3.1. SEÇÃO DE CHOQUE

A probabilidade de um nêutron realizar certa reação com algum isótopo depende da seção de choque microscópica para a dada reação na energia em que se encontra o nêutron. A seção de choque microscópica pode ser compreendida como a área efetiva do núcleo de um isótopo para uma determinada reação com um nêutron com determinada energia. Logo a seção de choque microscópica varia conforme a reação considerada e, para uma mesma reação, conforme a energia que o nêutron possui.

A seção de choque microscópica possui como unidade o *barn*, na qual

$$1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2. \quad (3.1)$$

A seção de choque microscópica representa a probabilidade de ocorrer uma reação entre um nêutron e um isótopo. A chance de uma reação ocorrer em um volume de material é dada pela seção de choque macroscópica, definida como

$$\Sigma = N\sigma \quad (3.2)$$

na qual  $\Sigma$  é a seção de choque macroscópica em  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\sigma$  é a seção de choque microscópica em  $\text{cm}^2$ , e  $N$  é a densidade atômica do material em  $\text{átomo} \cdot \text{cm}^{-3}$ .

A seção de choque microscópica total é a soma das seções de choque microscópicas de espalhamento, fissão e captura radiativa.

A seção de choque macroscópica de um material é dada pelo seguinte somatório

$$\Sigma = \sum_{t=1}^n N_t \sigma_t \quad (3.3)$$

na qual  $n$  representa o enésimo isótopo que constitui o material.

### 3.2. FLUXO DE NÊUTRONS E TAXA DE REAÇÃO

O fluxo de nêutrons é a grandeza que mede o número de nêutrons que atravessam uma dada área em um dado intervalo de tempo, tendo assim como unidade  $\text{nêutron} \cdot \text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ .

Pode-se agora definir a taxa de reações como sendo

$$R = \Phi \Sigma \quad (3.4)$$

na qual  $R$  é a taxa de reação em  $\text{reações} \cdot \text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $\Phi$  o fluxo de nêutrons e  $\Sigma$  a seção de choque macroscópica para a reação em questão.

### 3.3. ESPALHAMENTOS

Espalhamentos são interações entre um nêutron e o núcleo de um átomo nas quais um nêutron incide sobre o núcleo atômico e um nêutron (podendo este ser diferente do nêutron incidente) deixa o núcleo.

Os espalhamentos são as reações responsáveis pela moderação dos nêutrons do reator. Moderação de nêutrons implica em reduzir sua energia. Isso é vantajoso em um reator nuclear, pois as seções de choque de fissão são maiores para nêutrons térmicos, tipicamente com energias menores que  $1 \text{ eV}$ .

As reações de espalhamento podem ser divididas em duas categorias:

Espalhamento Inelástico: No espalhamento inelástico o nêutron incidente é absorvido pelo núcleo com a subsequente emissão de um nêutron de menor energia cinética, deixando assim o núcleo em um estado excitado. O núcleo irá então emitir um ou mais raios-gama, de forma a retornar a seu estado fundamental. A energia liberada pelos raios-gama é igual à diferença entre a energia cinética do sistema nêutron-núcleo antes da absorção e após a emissão dos nêutrons.

Espalhamento Elástico: O espalhamento elástico é aquele em que a energia cinética e o momento linear do sistema nêutron-núcleo se conservam.

O espalhamento elástico pode ocorrer de duas maneiras:

Espalhamento elástico potencial: é aquele que pode ser compreendido como uma colisão clássica entre corpos rígidos. Neste tipo de interação o nêutron incidente é espalhado pela força forte, de curto alcance. Típico para nêutrons de energia de até 1 MeV.

Espalhamento elástico de ressonância: este tipo de espalhamento é mais raro que o potencial, sendo fortemente dependente da energia inicial do nêutron. Nesta interação o nêutron incidente é absorvido pelo núcleo com a subsequente emissão de um nêutron (podendo este ser o próprio nêutron incidente) de forma que a energia cinética do sistema se conserve e o núcleo retorne ao seu estado energético fundamental.

### 3.4. DISTRIBUIÇÃO DE MAXWELL-BOLTZMANN

A distribuição de Maxwell-Boltzmann descreve a velocidade e a energia de partículas em um gás em função da temperatura deste, as hipóteses impostas por esta distribuição são de que as colisões entre as partículas são elásticas e de que só ocorre interação entre as partículas no momento da colisão.

Se os espalhamentos forem considerados elásticos, e se for considerado que os nêutrons não interagem entre si, mas apenas com os materiais do reator, ambas as considerações aceitáveis, é possível estender as hipóteses da distribuição de Maxwell-Boltzmann aos nêutrons térmicos de um reator nuclear, ou seja, aos nêutrons que se encontram em equilíbrio térmico com os materiais do reator.

A distribuição de Maxwell-Boltzmann das velocidades pode ser definida como

$$dN_0 = \frac{4\pi v^2 N_0}{(\pi kT)^{3/2}} e^{-mv^2/2kT} dv = N(v) dv \quad (3.5)$$

na qual  $N_0$  é a norma da distribuição,  $m$  é a massa das partículas em  $kg$ ,  $v$  é a velocidade em  $m.s^{-1}$ ,  $T$  é a temperatura em  $K$ , e  $k$  é a constante de Boltzmann, sendo  $k = 1,3806 * 10^{-23} J/K = 8,6173 * 10^{-5} eV/K$ .  $N(v)dv$  representa o número de partículas com velocidade entre  $v$  e  $v + dv$ .

A distribuição também pode ser descrita em função da energia da seguinte maneira

$$dN_0 = \frac{2\pi N_0}{(\pi kT)^{3/2}} \sqrt{E} e^{-E/kT} dE = N(E) dE \quad (3.6)$$

na qual  $E$  é a energia da partícula em  $J$  ou  $eV$ . Para este trabalho a distribuição da energia é muito mais propícia que a de velocidades, de maneira que todas as distribuições calculadas são em função da energia.  $N(E)dE$  representa o número de partículas com energia entre  $E$  e  $E + dE$ .

As distribuições de velocidade e energia possuem propriedades importantes que se encontram listadas na Tabela 3.1.



Tabela 3.1 – Propriedades das distribuições Maxwell-Boltzmann para velocidade e energia. (Fonte: <http://holbert.faculty.asu.edu/eee562/ThermalNeutronFlux.pdf>, 09/12/2012, modificado)

	Energia	Velocidade
Média	$E_{média} = \frac{3}{2} kT$	$v_{média} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}$
Moda	$E_{moda} = \frac{1}{2} kT$	$v_{moda} = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$

#### 4. O PROGRAMA *CONTINUOUS* E O MÉTODO DE MONTE CARLO

De acordo com [Camargo, 2011], para poder simular as reações que ocorrem dentro de um reator nuclear deve-se poder determinar a distribuição dos nêutrons. Para tanto se deve determinar o processo de transporte desses. Tal processo de transporte é descrito pela equação de transporte de Boltzmann. Entretanto tal equação é de difícil solução, de maneira que se torna mais prático recorrer a métodos estocásticos. Portanto, neste trabalho utilizou-se o programa *Continuous*, que implementa o método de Monte Carlo físico, simulando a sequência de processos microscópicos que ocorrem em um reator nuclear.

##### 4.1. DESCRIÇÃO DO PROGRAMA *CONTINUOUS*

O programa utilizado neste trabalho foi criado e cedido por [Camargo, 2011]. Neste programa, escrito em linguagem C++, o cálculo de nêutrons é realizado em passos Monte Carlo, onde em cada passo um nêutron pode sofrer uma captura radioativa, um espalhamento, ou causar uma fissão.

O programa inicia com um determinado número de nêutrons cuja distribuição energética é dada pelo espectro de fissão do  $^{235}\text{U}$ . O espectro de fissão foi parametrizado conforme

$$N(E) = 1756 \sqrt{E} \exp(-0,775 E) \quad (4.1)$$

na qual  $E$  representa a energia em  $\text{MeV}$ , e as constantes possuem dimensões de  $\text{MeV}^{-1/2}$  e  $\text{MeV}^{-1}$ , respectivamente.

A Equação 4.1 gera o espectro de fissão apresentado na Figura 4.1.

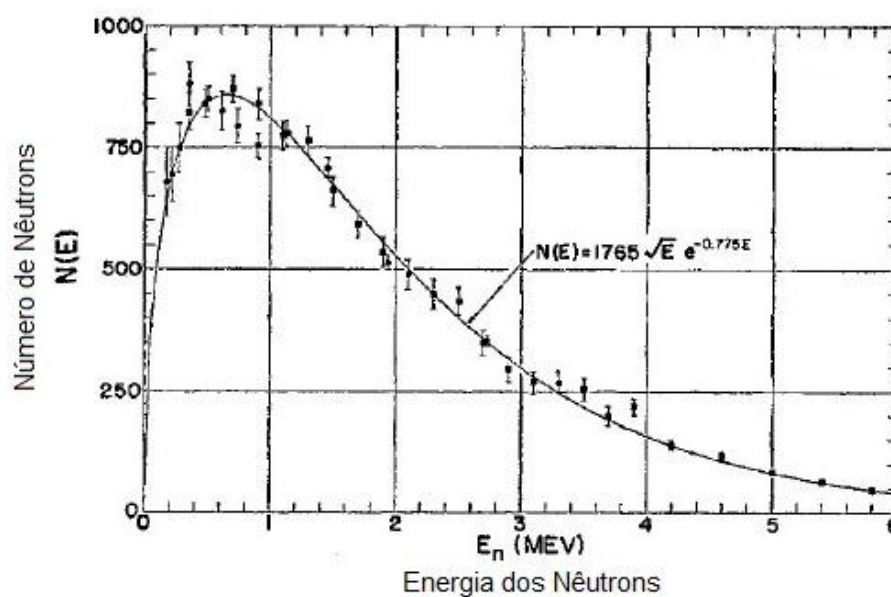


Figura 4.1 – Espectro de nêutrons não normalizado da fissão do  $^{235}\text{U}$ . (Fonte: Camargo, 2011)

O programa cria a história de cada nêutron como pode ser visto no fluxograma da Figura 4.2.

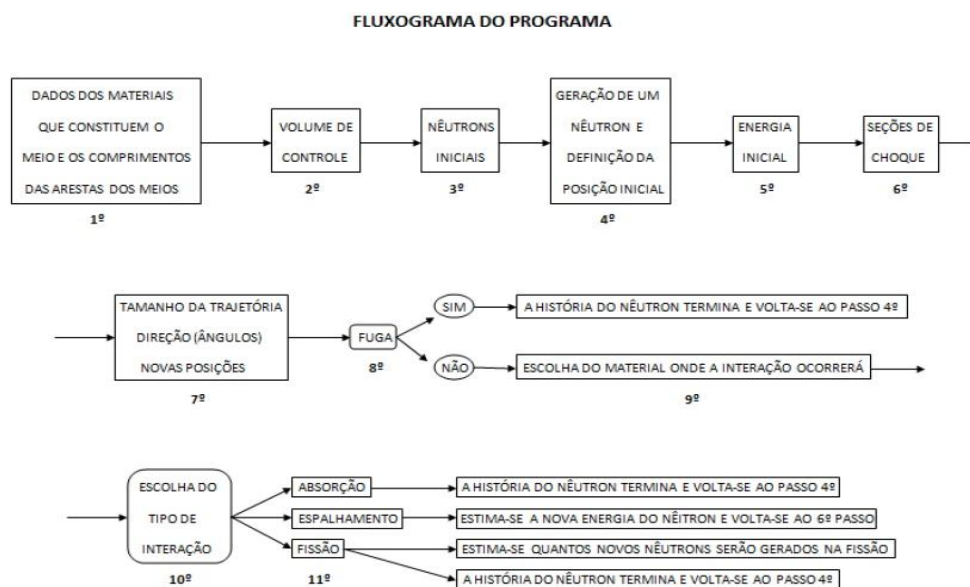


Figura 4.2 - Fluxograma do programa *Continuous*. (Fonte: Camargo, 2011)

A probabilidade de uma determinada reação ocorrer é dada pela divisão da seção de choque macroscópica da dada reação pela seção de choque macroscópica total do material em que o nêutron se encontra, conforme indicado na Equação 4.2.

$$P_i = \frac{\Sigma_i}{\Sigma_T} \quad (4.2)$$

No programa em questão o reator é tido como um cubo de 10 cm de lado. Como a cada espalhamento ocorrido calcula-se uma nova coordenada para o nêutron, no caso desta coordenada encontrar-se fora do volume de controle, a história do nêutron é encerrada e conta-se a ocorrência de uma fuga.

Deve-se ressaltar que o programa considera que existem apenas dois materiais no reator, dióxido de urânio e água leve. Cada material ocupa metade do volume do reator. Além disso, considera-se que o urânio apresenta enriquecimento de 5%, ou seja, 95% dos isótopos são  $^{238}\text{U}$  e apenas 5% são  $^{235}\text{U}$ .

#### 4.2. ALTERAÇÕES REALIZADAS NO PROGRAMA

Foram realizadas, para a execução deste trabalho, algumas modificações no programa *Continuous*. Tais modificações são a homogeneização do material, a desconsideração de fugas e de captura radiativa e a introdução de um critério de parada para o programa. O reator do programa original operava numa zona subcrítica ( $K < 1$ ), de forma que o programa encerrava sua execução quando não houvesse mais nêutrons no reator. Com as mudanças realizadas o reator passou a operar em um zona supercrítica ( $K > 1$ ), de forma que foi necessário incluir um critério de parada baseado no número de passos Monte Carlo realizados.

Para que não houvesse fugas no programa modificou-se o cálculo no critério de que, ao ocorrer o espalhamento, a posição do nêutron passou a não ser recalculada. De tal maneira foi necessário também homogeneizar o material para que o nêutron sempre possuísse chance de se encontrar no dióxido de urânio ou na água.

A homogeneização do material foi feito em respeito às densidades atômicas da água ( $0,03343 * 10^{24}$  [átomos.cm<sup>-3</sup>]) e do dióxido de urânio ( $0,026 * 10^{24}$  [átomos.cm<sup>-3</sup>]), logo a probabilidade do nêutron se encontrar no dióxido de urânio em relação à probabilidade de se encontrar na água é de:

$$\frac{0,026}{0,03343} = 0,78 \quad (4.3)$$

Isso resulta em uma probabilidade de 0,56 de o nêutron se encontrar na água e de 0,44 de se encontrar no dióxido de urânio, independente da energia do nêutron.

Para a desconsideração da captura radiativa o procedimento tomado foi o de igualar a seção de choque de captura radiativa de todos os isótopos do reator à zero. Tal procedimento altera a dinâmica do reator, pois altera a seção de choque total, bem como a proporção entre as probabilidades de ocorrência de fissão e de espalhamento. Essa simplificação é realizada para que o programa possa ser executado com um menor número de nêutrons, contudo, apesar da dinâmica do reator não corresponder a um reator real, a metodologia para o tratamento das populações recorrentes e transientes proposta neste trabalho mantém-se a mesma.

#### 5. PROBLEMÁTICA DE UP-SCATTERING E DOWN-SCATTERING

Há diversas maneiras de se simular as reações que ocorrem em um reator nuclear. Isso é especialmente válido para simulação das reações de espalhamento.

Uma das maneiras mais simples de se simular as reações de espalhamento é conforme utilizado por [Camargo, 2011] em seu programa

$$E_{i+1} = \frac{A^2 + 1 + 2A\cos\theta}{(A + 1)^2} E_i \quad (5.1)$$

na qual  $A$  é a massa atômica do meio.

Simular o espalhamento desta maneira acarreta em erros, pois pela Equação 5.1 os nêutrons podem apenas perder energia em um espalhamento (*down-scattering*), sendo que o oposto (*up-scattering*) pode ocorrer e não está sendo considerado. A grande vantagem de se utilizar uma equação como a Equação 5.1 para simular o espalhamento é seu pequeno tempo computacional frente à abordagens que consideram a possibilidade de *up-scattering*, como, por exemplo, colisão clássica entre partículas.

*Up-scattering* é oriundo do fato de que os alvos não estão em repouso, mas sim em movimento térmico que, portanto, pode transferir energia e momento para o nêutron. O objetivo deste trabalho é implementar um método que simule a possibilidade de *up-scattering* sem recorrer a métodos que elevem significativamente o tempo computacional.

Para simular o *up-scattering* parte-se da premissa de que existe no reator uma parcela da população de nêutrons que se encontra em equilíbrio térmico com o reator e, portanto, obedecem à distribuição de Maxwell-Boltzmann.

Os nêutrons existentes em um reator nuclear podem agora ser divididos conforme dois regimes diferentes:

Regime Recorrente: Está neste regime a parcela de nêutrons que representa uma amostra em equilíbrio térmico com o reator. Neste regime os espalhamentos podem ser tanto de *up-scattering* quanto de *down-scattering*, sendo que, para uma grande amostra, a distribuição de energias dos nêutrons da amostra se mantém constante e obedece à distribuição Maxwell-Boltzmann.

Os nêutrons em regime recorrente não precisam ter sua energia recalculada após uma reação de espalhamento, pois, na amostra, as energias não se alteram. Desta forma o *up-scattering* é simulado pela distribuição de Maxwell-Boltzmann e pelo fato de não se calcular o *down-scattering* para os nêutrons que fazem parte desta distribuição.

Regime transiente: Está em regime transiente a parcela da população de nêutrons do reator que realizam apenas *down-scattering* e não se encontram no regime recorrente. Os nêutrons em regime transiente não obedecem a uma distribuição Maxwell-Boltzmann, pois não estão em equilíbrio térmico com o reator, e possuem energia superior aos componentes do reator que se encontram na temperatura de operação deste. Desta forma pode-se assumir que estes nêutrons são bem descritos pela Equação 5.1, onde podem apenas perder energia em uma reação de espalhamento.

## 5.1. RELAÇÃO ENTRE DISTRIBUIÇÕES TRANSIENTES E RECORRENTES

Seja  $\Phi(E, t)$  uma distribuição que possui para cada instante de tempo uma determinada normalização  $N(t)$ , tal que  $N(t) < \infty$ , pode-se definir a normalização como

$$N(t) = \int_0^{\infty} \Phi(E, t) \cdot dE \quad (5.2)$$

Também é possível definir a seguinte razão entre as normalizações de subconjuntos da população representada pela distribuição  $\Phi(E, t)$

$$R(E_s, t) = \frac{\int_0^{E_s} \Phi(E, t) \cdot dE}{\int_{E_s}^{\infty} \Phi(E, t) \cdot dE} \quad (5.3)$$

na qual  $E_s$  representa o limiar que separa os subconjuntos.

Adicionalmente podem-se definir as propriedades transientes das normalizações pela seguinte equação

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{E_s} \Phi(E, t) \cdot dE = - \frac{\partial}{\partial t} \int_{E_s}^{\infty} \Phi(E, t) \cdot dE + \dot{S}(E, t) \quad (5.4)$$

na qual  $\dot{S}(E, t)$  representa um termo de fonte.

Tais conceitos definidos anteriormente podem ser aplicados a um reator nuclear, onde  $\Phi(E, t)$  representa o espectro de nêutrons que se encontram no reator e  $N$  o número total de nêutrons. Além disso, para o caso de um reator operando em regime recorrente o formato da distribuição dos nêutrons no reator não se altera, apesar de sua normalização poder se alterar, de maneira que  $R(E_s, t) = R(E_s)$ . Por último podemos relacionar  $\dot{S}(E, t)$  da seguinte maneira

$$\dot{S}(E, t) \propto \nu \cdot \lambda_F \cdot N \quad (5.5)$$

na qual  $\nu$  representa o número de novos nêutrons criados em uma fissão e  $\lambda_F$  representa a taxa de fissão.

São definidas duas normalizações,  $N_R$ , que representa a normalização de uma distribuição  $\phi(E, t)$ , e  $N_T$ , que representa a normalização de uma distribuição  $\psi(E, t)$ . Onde  $\phi(E, t)$  representa a distribuição dos nêutrons em regime recorrente (Maxwell), e  $\psi(E, t)$  representa a distribuição de nêutrons rápidos, de forma que

$$N_R + N_T = N, \quad (5.6)$$

$$\phi(E, t) + \psi(E, t) = \Phi(E, t). \quad (5.7)$$

Pode-se então definir as equações diferenciais que governam o equilíbrio entre as populações de nêutrons recorrentes e nêutrons transientes. Conforme [Bodmann, 2012], elas formam o seguinte sistema

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} N_R = -\lambda_{FR} \cdot N_R + \lambda_{T \rightarrow R} \cdot N_T \\ \frac{\partial}{\partial t} N_T = -\lambda_{FT} \cdot N_T - \lambda_{T \rightarrow R} \cdot N_T + \nu \cdot \lambda_{FR} \cdot N_R \end{cases} \quad (5.8)$$

no qual  $\lambda_{FT}$  representa a taxa de fissão causada pelos nêutrons transientes,  $\lambda_{FR}$  a taxa de fissão causada pelos nêutrons recorrentes e  $\lambda_{T \rightarrow R}$  a taxa de transferência de nêutrons entre os regimes transiente e recorrente. Pelo fato de a seção de choque de fissão para os nêutrons em regime transiente ser muito menor que a seção de choque de fissão para nêutrons em regime recorrente, a taxa de fissão dos nêutrons em regime transiente acaba sendo menor que a taxa de fissão em regime recorrente. Pode-se então desprezar o termo  $\nu \cdot \lambda_{FT} \cdot N_T$  frente ao termo  $\nu \cdot \lambda_{FR} \cdot N_R$ .

Aplicando a transformada de Laplace ao sistema e escrevendo em forma matricial têm-se

$$\begin{pmatrix} s + \lambda_{FR} & -\lambda_{T \rightarrow R} \\ -\nu \cdot \lambda_{FR} & s + \lambda_{FT} + \lambda_{T \rightarrow R} \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} \overline{N_R} \\ \overline{N_T} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{R0} \\ N_{T0} \end{pmatrix} \quad (5.9)$$

Aplicando a regra de Cramer ao sistema linear encontra-se

$$\overline{N_R} = \frac{s \cdot N_{R0} + \lambda_{FT} \cdot N_{R0} + \lambda_{T \rightarrow R} \cdot (N_{R0} + N_{T0})}{s^2 + s \cdot (\lambda_{FT} + \lambda_{FR} + \lambda_{T \rightarrow R}) + \lambda_{FT} \cdot \lambda_{FR} + (1 - \nu) \cdot \lambda_{FR} \cdot \lambda_{T \rightarrow R}} \quad (5.10)$$

$$\overline{N_T} = \frac{s \cdot N_{T0} + \lambda_{FR} \cdot (N_{R0} + N_{T0})}{s^2 + s \cdot (\lambda_{FT} + \lambda_{FR} + \lambda_{T \rightarrow R}) + \lambda_{FT} \cdot \lambda_{FR} + (1 - \nu) \cdot \lambda_{FR} \cdot \lambda_{T \rightarrow R}} \quad (5.10)$$

Pelo teorema de Heaviside para inversão da transformada de Laplace tem-se que:

$$N_R = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\zeta_i \cdot N_{R0} + \lambda_{FT} \cdot N_{R0} + \lambda_{T \rightarrow R} \cdot (N_{R0} + N_{T0})}{2 \cdot \zeta_i + (\lambda_{FT} + \lambda_{FR} + \lambda_{T \rightarrow R})} \right) \cdot e^{\zeta_i \cdot t} \quad (5.12)$$

$$N_T = \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\zeta_i \cdot N_{T0} + \lambda_{FR} \cdot (N_{R0} + N_{T0})}{2 \cdot \zeta_i + (\lambda_{FT} + \lambda_{FR} + \lambda_{T \rightarrow R})} \right) \cdot e^{\zeta_i \cdot t} \quad (5.13)$$

na qual

$$\zeta_1 = \frac{-b + \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (5.14)$$

$$\zeta_2 = \frac{-b - \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a} \quad (5.15)$$

na qual

$$a = 1 \quad (5.16)$$

$$b = (\lambda_{FT} + \lambda_{FR} + \lambda_{T \rightarrow R}) \quad (5.17)$$

$$c = \lambda_{FT} \cdot \lambda_{FR} + (1 - \nu) \cdot \lambda_{FR} \cdot \lambda_{T \rightarrow R} \quad (5.18)$$

De acordo com [Bodmann, *et al.*, 2010 e Rodriguez, *et al.*, 2011], para calcular a taxa de transferência de nêutrons entre os regimes pode-se definir a seguinte integral:

$$\lambda_{T \rightarrow R} = \int_0^{\infty} \chi_r \epsilon_t \Sigma_s V dE \quad (5.19)$$

na qual  $V$  é o volume do reator em  $cm^3$ ,  $\Sigma_s$  é a seção de choque de espalhamento em  $cm^{-1}$ ,  $\epsilon_t$  é o fluxo total de nêutrons em  $s^{-1} \cdot cm^{-2}$ , e  $\chi_r$  é uma distribuição de Maxwell normalizada para os nêutrons térmicos.

Essa integral pode ser simplificada para

$$\lambda_{T \rightarrow R} = \int_0^{\infty} \chi_r \lambda_{\Sigma_s} dE \quad (5.20)$$

na qual  $\lambda_{\Sigma_s}$  é a taxa de espalhamentos em  $s^{-1}$ .

## 6. METODOLOGIA PROPOSTA

Após a execução do programa *Continuous* obtém-se um vetor cujo tamanho representa o número de nêutrons que se encontram no reator ao fim do número de passos Monte Carlo rodado, e os elementos representam as energias dos nêutrons em  $MeV$ . Deve-se então identificar os nêutrons em regime recorrente e em regime transiente.

Isso pode ser feito de maneira iterativa partindo-se da premissa que o nêutron de menor energia encontra-se definitivamente em regime recorrente. A energia desse nêutron é retirada do vetor que compõe a população total e adicionado a um novo vetor que representa a população recorrente. Cria-se então uma distribuição de Maxwell cuja média é igual à média dos elementos do vetor que representa a população recorrente. Para fins de nomenclatura o

vetor que representa a população total com menos elementos que o total da população será tido como representante da população transiente.

Pode-se agora retirar um novo nêutron do vetor dos nêutrons transientes e adicioná-lo ao vetor dos nêutrons recorrentes. Isso deve ser feito de forma aleatória. Os números aleatórios devem respeitar a distribuição de Maxwell encontrada anteriormente. Com um novo nêutron no vetor dos nêutrons recorrentes a média do vetor é recalculada e encontra-se um novo parâmetro para a distribuição de Maxwell com a qual se retirará o próximo nêutron.

O processo iterativo descrito deve ser repetido um número  $Nr$  de vezes, onde  $Nr$  representa o número de nêutrons que saíram do regime transiente e entraram em regime recorrente. Este número pode ser calculado pela integral do produto de uma distribuição de Maxwell normalizada (que representa a população recorrente) pela distribuição que representa a população total de nêutrons, de forma que

$$Nr = \int_0^{\infty} \varphi(E)\Omega(E)dE \quad (6.1)$$

na qual  $\varphi(E)$  representa a distribuição de Maxwell encontrada nos passos do processo iterativo descrito anteriormente nesta seção, e  $\Omega(E)$  representa a função que interpola os dados de um histograma da população total de nêutrons, representando assim a distribuição da população de nêutrons e com normalização igual ao tamanho da população.

Com isso tem-se um critério para encontrar o tamanho da população recorrente, O processo que adiciona nêutrons ao vetor da população recorrente deve ser repetido até que o valor de arredondado de  $Nr$  seja igual ao número de elementos que compõe o vetor.

Ao final do processo têm-se dois vetores, um com as energias da população recorrente e outro com as energias da população transiente. O vetor com as energias da população transiente irá servir de entrada para os próximos passos Monte Carlo executados pelo programa *Continuous* modificado. O mesmo vale para o vetor das energias da população recorrente, com uma única diferença, quando os nêutrons cujas energias então nesse vetor sofrem uma reação de espalhamento, suas energias não são alteradas. Faz-se essa simplificação, pois, na média, as energias da população em regime recorrente não se alteram, isso ocorre pelo fato da população estar em equilíbrio térmico com o reator.

Outra informação que é retirada do processo de separação das populações é o parâmetro de temperatura que se obtém ao se encontrar a distribuição de Maxwell que governa os nêutrons térmicos. Essa temperatura é uma estimativa para a temperatura de funcionamento do reator, porém deve-se ter em mente de que esta temperatura é dada pela hipótese de que em cada instante de tempo há uma condição de equilíbrio entre a população recorrente e o reator, sendo os parâmetros termohidráulicos do reator responsáveis por retirar calor na mesma taxa em que energia é liberada pela taxa de fissão no dado momento. Lembra-se que na análise feita não foi considerada a variação das seções de choque com a temperatura, outro importante fator da física de reatores.

## 7. RESULTADOS

O programa *Continuous* modificado foi executado, simulando 1000 nêutrons e 10 passos Monte Carlo. Os números de nêutrons e de passos foram escolhidos por tentativa e erro, ou seja, realizaram-se testes com diferentes números de passos e nêutrons para que os resultados fossem relativos à uma população significativa e que o tempo de processamento não fosse muito elevado.

A saída de dados do programa *Continuous* é feita na forma de um arquivo de texto que contém as energias dos nêutrons que se encontram no reator ao final do décimo passo Monte Carlo. A partir deste arquivo de texto um programa criado no software *Scilab 5.4.0* cria

dois novos arquivos de textos com as energias dos nêutrons em regime recorrente e transiente, este programa também é responsável pela criação dos gráficos.

Antes de propriamente calcularem-se as energias recorrentes e transientes, deve-se estabelecer a distribuição  $\Omega(E)$  para a população total de nêutrons. Isso foi feito por inspeção visual onde se adaptou uma distribuição de Maxwell ao histograma da população total. A norma da distribuição foi dada pelo número de nêutrons totais que neste caso é  $N_0 = 1135$ .

Na Figura 7.1 é possível observar o ajuste entre o histograma normalizado da população total e a distribuição  $\Omega'(E)$ . Onde  $\Omega'(E)$  é uma distribuição de Maxwell que possui o mesmo parâmetro  $kT$  de  $\Omega(E)$ , mas possui norma unitária.

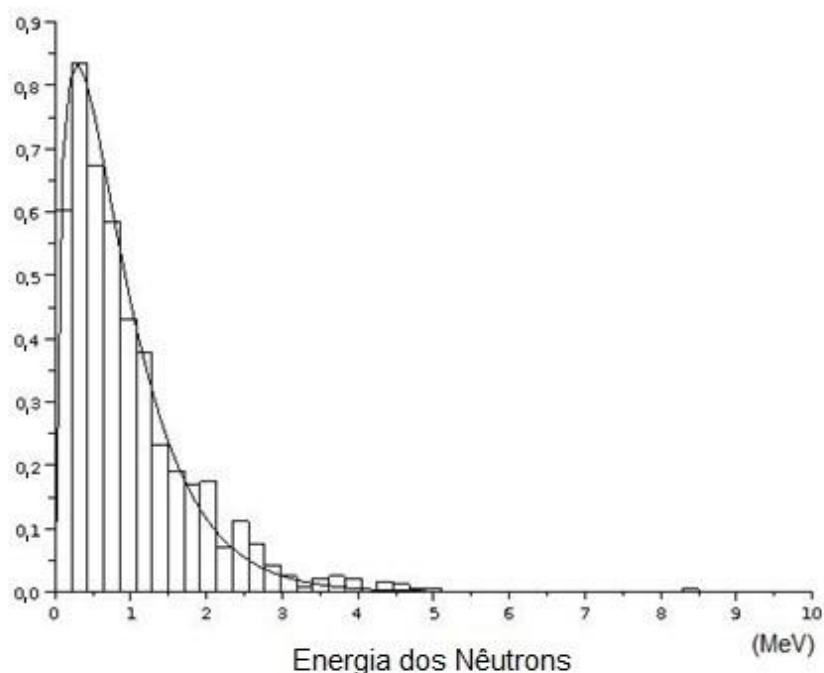


Figura 7.1 – Comparação entre função  $\Omega'(E)$  e histograma da população total.

Pela Figura 6.1 é possível definir que o parâmetro  $kT$  da distribuição  $\Omega'(E)$  e consequentemente da distribuição  $\Omega(E)$  é  $kT = 0,58 \text{ MeV}$ .

Com isso é possível obter os demais resultados. Obteve-se que dos 1135 nêutrons da população total 469 nêutrons fazem parte do regime recorrente e 666 nêutrons fazem parte do regime transiente.

Além disso, estimou-se que a população recorrente obedece a uma distribuição de Maxwell com parâmetro  $kT = 0,9205 \text{ MeV}$ . Na Figura 7.2 pode-se ver o histograma normalizado da população recorrente e a curva da distribuição normalizada de parâmetro  $kT = 0,9205 \text{ MeV}$ .



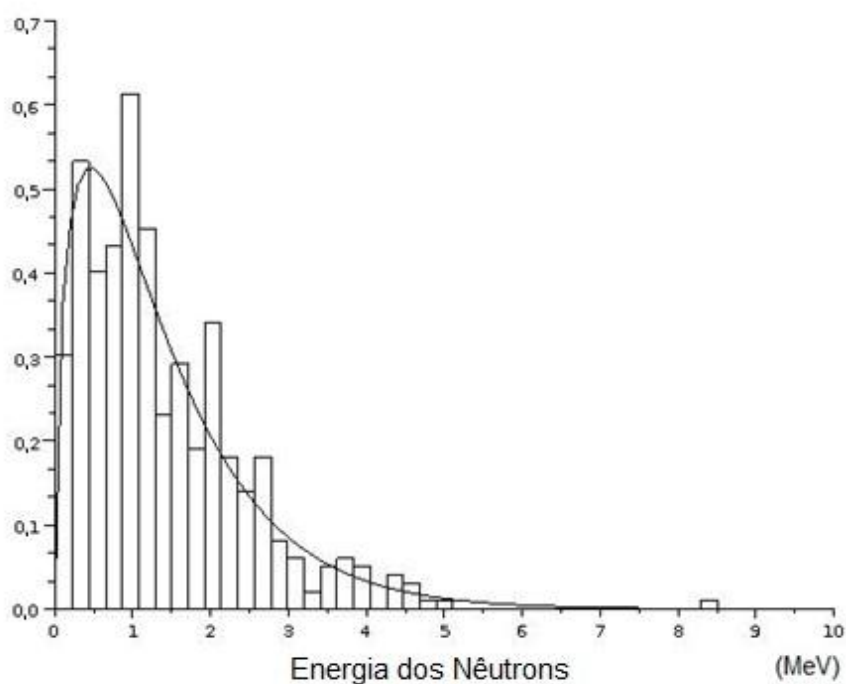


Figura 7.2 – Histograma normalizado da população recorrente e distribuição de Maxwell a que a população obedece.

Agora é possível comparar as distribuições normalizadas da população de nêutrons total e da população recorrente, conforme mostrado na Figura 7.3.

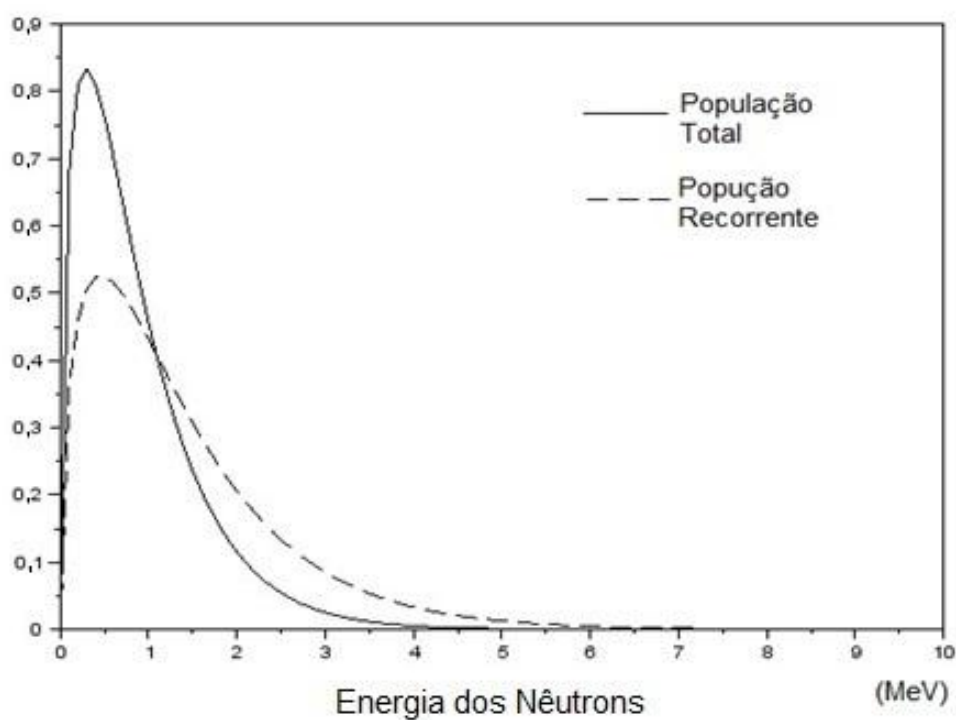


Figura 7.3 – Distribuições das populações total e recorrente.

## 8. CONCLUSÕES

Nos resultados obtidos percebe-se que o parâmetro da distribuição de Maxwell que descreve os nêutrons em regime recorrente ( $kT = 0,9205 \text{ MeV}$ ) é superior ao parâmetro da distribuição de Maxwell que descreve o total da população ( $kT = 0,58 \text{ MeV}$ ). Isso implica que os nêutrons em regime recorrente apresentam em média, e em valor mais provável, energia superior aos nêutrons da população total. Fato este que fica evidenciado na Figura 6.3.

Como os arquivos de nêutrons recorrentes e nêutrons transientes irão realimentar o programa *Continuous* e como os nêutrons recorrentes não terão sua energia alterada ao sofrer um espalhamento, pode-se afirmar que a média da energia dos nêutrons obtidos ao final da nova execução do programa *Continuous* é maior do que a média de energia de uma população em que o processo sugerido não tenha sido implementado e todos os nêutrons fossem tratados da mesma maneira.

Caso o programa *Continuous* seja executado novamente, os nêutrons da população transiente, ao realizarem um espalhamento, terão sua energia diminuída. Em contrapartida, os nêutrons da população recorrente manterão sua energia, cuja média é maior que a média da população transiente, já no início da nova execução. Assim a população total ao final dos próximos 10 passos Monte Carlo terá uma média energética maior do que no caso em que o programa é executado por 20 passos Monte Carlo sem que a metodologia descrita nesse trabalho seja implementada.

Sob esta ótica pode-se afirmar que a metodologia sugerida para a simulação de *up-scattering* é válida, ao menos de maneira qualitativa. Para que essa metodologia pudesse ser validada quantitativamente deveria ter sido simulado um reator muito mais próximo do real, com um número de nêutrons muito mais elevado, além de, obviamente, ter acesso aos dados de reatores em operação.

Este trabalho apresenta um primeiro passo na utilização de uma distribuição de Maxwell-Boltzmann na simulação de *up-scattering*, assunto sobre o qual não há literatura disponível. Espera-se que este trabalho estimule um maior número de pesquisas na área.

**REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

BODMANN, B.; **Comunicação Privada**, 2012

BODMANN, B.; VILHENA, M. T. ; FERREIRA, L. S. ; BARDAJI, J. B. .**“An analytical solver for the multi-group two dimensional neutron-diffusion equation by integral transform techniques.”**Il Nuovo Cimento della Società Italiana di Fisica. C. Geophysics and Space Physics (Online), v. 33, p. 1-10, 2010.

Camargo, D. Q.; **“Um modelo estocástico de simulação neutrônica, considerando o espectro e propriedades nucleares com dependência contínua de energia”**, tese de doutorado em engenharia, Porto Alegre, janeiro de 2011.

Holbert, K.E.;**“Thermal Neutrons”**,  
<http://holbert.faculty.asu.edu/eee562/ThermalNeutronFlux.pdf>, Acessado em 09/12/2012.

Reuss, P.; **“Neutron Physics”**, EDP Sciences, 2008.

RODRIGUEZ, B. A. ; VILHENA, M. T. ; BODMANN, B. . **“An Overview Of The Boltzmann Transport Equation Solution For Neutrons, Photons And Electrons In Cartesian Geometry. Progress in Nuclear Energy”** (New series), v. 53, p. 1119-1125, 2011

Sekimoto, H.; **“Nuclear Reactor Theory”**, Tokyo Institute of Technology, 2007.

Zweifel, P.F.; **“Reactor Physics”**. McGraw-Hill, 1973.

TURNER, J. E.; **“Atoms, Radiation, and Radiation Protection”**, 2007 WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2007.

## APÊNDICES

### I. DEFINIÇÃO DO TEMPO MONTE CARLO

Um dos problemas encontrado pelo método de Monte Carlo é a definição de uma constante de tempo a que equivale um passo Monte Carlo. De fato para um único nêutron o tempo de um passo Monte Carlo é dado por:

$$t_{MC} = \frac{1}{v\Sigma(v, r)} \quad (1.1)$$

Na qual  $v$  é a velocidade do nêutron em  $cm.s^{-1}$ ,  $\Sigma$  é a seção de choque macroscópica para o material em que o nêutron se encontra em  $cm^{-1}$  e  $r$  é a posição do nêutron.

Para um maior número de nêutrons pode-se definir um tempo médio para um passo Monte Carlo, dado por:

$$\overline{t_{MC}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{v_i \Sigma_i(v, r)} \quad (1.2)$$

Na qual  $n$  representa o número total de nêutrons.

Se o número de nêutrons for suficientemente grande, pode-se substituir o somatório pela seguinte integral:

$$\overline{t_{MC}} = \frac{1}{V} \iint \frac{\zeta(E, r) \sqrt{m}}{\Sigma(E, r) \sqrt{2E}} dE d^3r \quad (1.3)$$

Na qual  $V$  é o volume do reator e  $\zeta(E, r)$  representa uma distribuição normalizada da população de nêutrons em função da posição e energia, também utilizou-se o fato de que

$v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ , sendo  $m$  a massa do nêutron e  $E$  sua energia.