

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

DETERMINAÇÃO DA PROBABILIDADE DE ESCAPE DE NÊUTRONS PELO  
MÉTODO DE MONTE CARLO

por

Glauber Sallaberry Kist

Dissertação para obtenção do Título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, 30 de Maio de 2016

DETERMINAÇÃO DE PROBABILIDADE DE ESCAPE DE NÊUTRONS POR MÉTODO  
DE MONTE CARLO

por

Glauber Sallaberry Kist  
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Energia

Orientador: Prof. Dr. Bardo E. J. Bodmann

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Rubem Mário Figueiró Vargas, Prof. Dr. – PUCRS

Prof. Dr. Volnei Borges, Prof. Dr. – PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Marco Túllio Vilhena, Prof. Dr. – PROMEC/UFRGS

Prof. Dr. Luiz Alberto Rocha  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 30 de Maio de 2016

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço à minha família, em especial aos meus pais e tias Adener e Lindamar Sallaberry. Ao PROMEC/UFRGS e COPPE/UFRJ pelo conhecimento. Aos colegas de curso, em especial aos que estiveram comigo no Rio – Luiz Felipe, Guilherme, Fernando, Milena e Fernanda pela amizade. Agradeço imensamente à Sylvana Gonçalves Dias e sua família pela hospitalidade. Ao prof. Bardo Bodmann pelos conselhos e orientação. Por fim, à CAPES e à sociedade que financiaram esta dissertação. Seguramente, a gratidão em palavras ainda seria insuficiente, desejo profundamente que meu trabalho retorne seus apoios.

## RESUMO

A presente dissertação desenvolveu uma metodologia para determinar a probabilidade de escape de nêutrons conforme a energia e posição no reator. Para tanto, simulou-se um reator qualitativo semi-infinito de secção quadrada composto por três regiões homogêneas distintas. O domínio do reator foi subdividido em cem subcamadas concêntricas uniformes para a análise da fuga de nêutrons. Desta maneira, o nascimento de cada nêutron em cada camada foi registrado, bem como sua energia inicial. Os cálculos das trajetórias dos nêutrons foram efetuados usando o Método de Monte Carlo Físico. Assim, o código gerou a história paralela de  $4 \times 10^6$  nêutrons, armazenando a energia final, posição final e fluxo angular na superfície. Desta forma, foi possível atribuir a probabilidade de escape de nêutrons provenientes de diferentes camadas conforme suas energias e posições iniciais. O método foi capaz de estabelecer o espectro de fuga, relações de dependência entre energia inicial e probabilidade de escape, além de observar que, sob certas condições, a probabilidade de escape possui crescimento exponencial ao longo do domínio.

Palavras-chave: Probabilidade de Escape; Fuga de Nêutrons; Simulação por Monte Carlo

## **ABSTRACT**

This work presents a methodology to determine the neutron escape probability according to its energy and start position in the reactor. A semi-infinite qualitative reactor was simulated by a C++ program. This reactor has three distinct homogeneous regions. It was subdivided into hundred uniform concentric layers for a statistical analysis, allowing to record the birth and initial energy of each neutron in each layer. The neutron's path calculation was performed using Monte Carlo. The program generated  $4 \times 10^6$  parallel neutron stories and has stored the final energy, position and angular flux.

Thus, we determined the neutron escape probability from different layers. The method was able to estimate the leakage dependency with initial energy and position and it showed that the escape probability has a exponential growth tendency along the domain in certain conditions.

Keywords: Escape Probability, Neutron Leakage, Monte Carlo Simulation

## ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
1.1	A Probabilidade de Escape de Nêutrons .....	1
1.2	Metodologia .....	3
<b>2</b>	<b>INTERAÇÕES DO NÊUTRON .....</b>	<b>5</b>
<b>3</b>	<b>PROBABILIDADE DE ESCAPE.....</b>	<b>7</b>
<b>4</b>	<b>MÉTODO DE MONTE CARLO.....</b>	<b>14</b>
4.1	Método de Monte Carlo Físico e suas Características.....	14
4.2	Simulação do Transporte de Nêutrons por Monte Carlo.....	17
<b>5</b>	<b>CASO DE ESTUDO DE PROBABILIDADE DE ESCAPE.....</b>	<b>20</b>
5.1	Caso de Estudo.....	20
5.2	Programa Continuous.....	20
5.3	Metodologia para Determinar Probabilidade de Escape.....	28
<b>6</b>	<b>RESULTADOS.....</b>	<b>32</b>
<b>7</b>	<b>CONCLUSÃO.....</b>	<b>47</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>49</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 5.1	Reator ideal da primeira versão do Continuous.....	21
Figura 5.2	Fluxograma do Continuous.....	22
Figura 5.3	Secção transversal do reator.....	25
Figura 5.4	Secção transversal do reator e suas camadas.....	30
Figura 6.1	Varição na população de nêutrons entre os passos 1 e 500.....	33
Figura 6.2	Número de nêutrons gerados por cm <sup>3</sup> em cada camada do núcleo. 34	
Figura 6.3	Número de fissões totais em cada camada do núcleo do reator.....	35
Figura 6.4	Valores de probabilidade de escape da camada 0 até a camada 79... 36	
Figura 6.5	Valores de probabilidade de escape da camada 90 até a 99.....	36
Figura 6.6	Números de fugas em cada ângulos de saída.....	37
Figura 6.7	Visão de ¼ do núcleo apresentando seus setores.....	38
Figura 6.8	Gráficos sobrepostos do espectro de escape do setor A .....	39
Figura 6.9	Gráficos sobrepostos do espectro de escape do setor B.....	40
Figura 6.10	Gráficos sobrepostos do espectro de escape do setor C.....	41
Figura 6.11	Gráficos sobrepostos dos espectros de A, B e C.....	42
Figura 6.12	Gráfico normalizado do espectro dos nêutrons dos quatro setores... 43	
Figura 6.13	Probabilidade de escape conforme a energia para A, B e C.....	44
Figura 6.14	Mapa de energia inicial e final dos nêutrons que escaparam.....	45
Figura 6.15	Mapa de energia inicial e final dos que escaparam em detalhe.....	46

## **LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS**

MMC	Método de Monte Carlo
PDF	Função Densidade de Probabilidade
PEE	Probabilidade de Escape Extrínseca
PEI	Probabilidade de Escape Intrínseca
PEN	Probabilidade de Escape de Nêutrons



# LISTA DE SÍMBOLOS

## 1. Caracteres Romanos

A	Área, m <sup>2</sup>
A	Número Aleatório
dx	Diferencial de distância
dE	Diferencial de Energia
dv	Diferencial de volume
E	Energia dos nêutrons, MeV
I	Corrente de nêutrons
K <sub>eff</sub>	Fator de multiplicação efetivo
L	Distância percorrida por um nêutron no passo Monte Carlo
N	Densidade atômica
n	Número de amostras
p <sub>c</sub>	Probabilidade de ocorrer captura
p <sub>f</sub>	Probabilidade de ocorrer fissão
p <sub>s</sub>	Probabilidade de ocorrer espalhamento
r	Vetor posição
S	Fator de cálculo do ponto de interação do nêutron no passo Monte Carlo
T	Taxa de interação de nêutrons
V	Volume
X	Espessura
x, y e z	Coordenadas espaciais

## 2. Caracteres Gregos

$\alpha$	Partícula alfa
$\beta$	Partícula beta
$\gamma$	Radiação Gama
$\lambda$	Comprimento de onda

$\sigma$	Sessão de choque microscópica
$\Sigma$	Sessão de choque macroscópica
$\theta$	Ângulo Zenital
$\varphi$	Ângulo Azimutal

# 1 INTRODUÇÃO

## 1.1 A Probabilidade de Escape de Nêutrons

Escape e fuga são termos sinônimos na física nuclear para descrever a condição de nêutrons que ultrapassaram os limites de um volume de controle, espalhando-se para fora do sistema. Já a probabilidade de escape de nêutrons (PEN) é uma propriedade estatística local que quantifica esta chance do nêutron de escapar, dado que sua velocidade e posição são conhecidas.

A probabilidade de escape de nêutrons em um reator nuclear consiste num campo escalar positivo onde, para cada energia e posição no domínio, existe um valor entre zero e 100%, correspondendo a probabilidade de fuga do nêutron com tais características naquela posição. A partir da determinação da PEN, é possível correlacionar essas probabilidades de escape com fluxos de saída, a dependência angular e na energia, entre outras características de operação.

A determinação da probabilidade de escape local associada ao fluxo de nêutrons na superfície do reator possui uma ampla gama de aplicações em modelos numéricos. Por exemplo, tais dados podem auxiliar as condições de contorno de métodos nodais. Além disso, outra estratégia seria adicionar uma pseudo “sessão de choque de escape” com objetivo de corrigir aproximações existentes em modelos que trabalham com grupos de energia e condições de contorno aproximadas.

As complexas interações que o nêutron pode realizar no meio material dificultam a determinação da PEN, sendo poucos os modelos teóricos voltados para seu estudo. De forma geral, grande parte das abordagens evita estratégias dependentes de fatores estocásticos como a probabilidade de escape, justamente porque seu tratamento demanda um suporte computacional ou técnico que nem sempre é factível. No entanto, o crescente incremento da capacidade dos processadores abre perspectiva para sua aplicação através de métodos estocásticos como o Monte Carlo.

O escape é um importante fator de operação em reatores nucleares, pois estes possuem um balanço sensível entre nêutrons produzidos pela fissão e perdidos por absorção e fuga. Isto se deve a rápida seqüência de interações que um nêutron pode realizar no nível atômico, correspondendo à ordem de microssegundos ou mais rápido que isto, conforme sua energia

(Reuss 2008). Assim, o fator multiplicativo dos nêutrons pode rapidamente crescer ou se extinguir, sendo este objeto do estudo do transporte de nêutrons.

A interação do nêutron no nêutron no reator depende de sete variáveis: três espaciais, duas angulares, uma temporal e outra variável na energia [Duderstadt, 1979]. Mesmo com os avanços nos métodos numéricos, ainda é um desafio solucionar problemas de transporte sem recorrer a hipóteses simplificativas ou a perda de refino em alguma informação. Por exemplo, uma estratégia tradicional é a divisão do espectro de energia dos nêutrons em grupos, de tal maneira que nêutrons com diferentes faixas de velocidade sejam inseridos num mesmo grupo, trabalhando-se, assim, com médias nas suas propriedades físicas – ao invés de funções contínuas. Outras estratégias são a imposição de condições de contorno aproximadas, redução e discretização de variáveis ou a aplicação hipóteses como a aproximação da difusão, solução  $P_n$  e  $S_n$ , entre outras [Reuss, 2008]. Por conseguinte, cada abordagem elege um conjunto de ferramentas que lhe confere vantagens em certos aspectos e desvantagem em outros. No caso dos exemplos citados, todos eles afetam diretamente a capacidade do modelo de descrever o fenômeno da fuga de nêutrons e, possivelmente por isso, este consiste num tópico com muitas questões em aberto.

A probabilidade de escape é diretamente influenciada pelo espectro de energia, características materiais e geometria do reator, havendo uma complexa dependência com estas variáveis [Lamarsh, 1966]. Apesar disso, sabe-se que antes da fuga, um nêutron pode realizar dezenas de espalhamentos no interior do meio. Portanto, mínimas variações em propriedades físicas, como seções de choque, agem de forma cumulativa e alteraram drasticamente a chance de um nêutron escapar. Além de tudo, alteram as formas de escape, como caminhos preferenciais, ângulos de saída conforme o espectro, entre outras características. Logo, todo modelo que busca avaliar a fuga de nêutrons com detalhe deve levar em conta a energia do nêutron e fatores que dela dependem, em especial, nas faixas de ressonância, onde estes valores sofrem mudanças bruscas.

Sendo assim, a atenção com a continuidade do espectro se justifica, não apenas por informar propriedades do fenômeno, mas principalmente, porque seu conhecimento aponta caminhos para aperfeiçoar modelos que se valem do uso de grupos de energias. Desta forma, é possível ajustar parâmetros e aperfeiçoar suas soluções. Como explicitado, uma das estratégias seria introduzir *ad hoc* uma "pseudo-sessão de choque de escape", corrigindo o erro gerado pelas aproximações do fluxo na fronteira e grupos de energia. Porém, essa suposta

"sessão de choque de escape" precisaria ser estimada previamente para cada geometria e ser o suficientemente refinada no espectro de energia. Contudo, após sua determinação, o campo de probabilidades de escape pode contribuir para uma família de métodos quando aplicados naquela mesma geometria.

Outra aplicação é a possibilidade de formar bancos de dados sobre a PEN de um determinado problema e reduzir etapas de cálculo de métodos numéricos. No entanto, o objetivo principal deste trabalho é apresentar uma fundamentação teórica, os meios técnicos de se estimar o campo de probabilidades de escape de nêutrons e o espectro de fuga de um caso de estudo. Para isto, elegeu-se uma geometria e para se estimar a PEN, aplicando um algoritmo baseado no método de Monte Carlo (MMC) conforme as proposições expostas.

## 1.2 Metodologia

Para cumprir com o objetivo proposto, utilizou-se o programa Continuous desenvolvido por Dayana de Camargo [de Camargo, 2011] e [de Camargo, 2013] e aperfeiçoado por Luiz Felipe Barcellos [Barcellos, 2016]. Este programa tem como sua principal inovação a capacidade de simular um reator quadrado de três regiões homogêneas concêntricas, sendo elas compostas por U-235, U-238, H-1 e O-16 em qualquer proporção. Além disso, o código foi fundamentado no Método de Monte Carlo, sendo capaz de simular nêutrons com espectro de energia contínuo. As sessões de choque dos materiais são parametrizadas em funções entre 0 e 20 MeV com erro menor que 5%, garantindo um rápido desempenho quando comparado a outros modelos que se valem de bancos de dados. A razão da escolha de um simulador baseado em Monte Carlo demanda um esclarecimento sobre a diferença entre métodos determinísticos e métodos estocásticos.

Métodos determinísticos consistem na maioria dos métodos numéricos clássicos. Sua estratégia consiste em discretizar o domínio e, então, aplicar algoritmos de cálculos conforme as equações e condições de contorno que regem o problema. Já os métodos estocásticos, também chamados de métodos de Monte Carlo, são uma ampla família de técnicas que simula fenômenos com auxílio de geradores de números randômicos. [Brandimarte, 2014]

Os métodos estocásticos contrastam em relação aos métodos numéricos determinísticos porque, para estes últimos, a implementação exige equações físicas gerais e condições de contorno bem definidas. Já os métodos de Monte Carlo simulam o fenômeno

físico diretamente, por vezes, sem mesmo se ter conhecimento da equação geral que governa o sistema. No caso de aplicações físicas, o único requisito é que o sistema seja fundamentalmente descrito por uma Função Densidade de Probabilidade (*Probability Density Function* – PDF). Uma vez que a PDF é conhecida, geram-se valores randômicos conforme a PDF. Em seguida, realiza-se uma seqüência de cálculos (ou passos) conforme o problema, retornando uma resposta ou “história”. Esta operação é realizada diversas vezes, formando um conjunto de "histórias" estatisticamente relevante. [Brandimarte, 2014]

Normalmente, métodos de Monte Carlo se tornam especialmente útil quando aplicados a problemas físicos com muitos graus de liberdade, como é o caso da Equação de Transporte. Neste aspecto, o MMC é relativamente vantajoso por não exigir a subdivisão do espectro em grupos e, conseqüentemente, não tratar as propriedades físicas por médias. Por esta razão, ele foi utilizado para aplicar a metodologia aqui desenvolvida.

Desta forma, o programa *Continuous* se apresenta como uma ferramenta válida para gerar um campo de probabilidade contínuo na energia. Foi escolhido como caso de estudo um reator semi-infinito de secção quadrada com 1m de lado e 10m de altura. O topo do reator possui condição de contorno reflexiva, enquanto as laterais possuem condição de vácuo. O reator tem um núcleo quadrado com 80cm de lado, constituído de urânio enriquecido a 7%. O núcleo é cercado por uma camada de 10cm de um moderador composto de água leve. Já a camada mais externa é uma blindagem de 10cm urânio 238 levemente enriquecido.

Inicialmente, realizou-se uma revisão bibliográfica sobre a interação de nêutrons livres, desenvolvida no capítulo 2. Já o capítulo 3 é dedicado a uma metodologia formulada para se definir e determinar a probabilidade de escape de nêutrons. O capítulo 4 apresenta o método de Monte Carlo.

O capítulo 5 descreve o programa *Continuous* e o meio usado para estimar a probabilidade de escape para o caso de estudo. Este capítulo também se dedica a explicar a história de desenvolvimento do programa *Continuous* e as alterações realizadas nesta dissertação para efetuar a estatística de escape dos nêutrons. Para este estudo, o reator foi seccionado em 100 sub-regiões concêntricas de 1cm cada. Todo nêutron, ao nascer numa dada região, tinha sua trajetória acompanhada e sua história registrada. O Capítulo 6 abordará os resultados gerados e conclusões obtidas a partir da simulação.

## 2 INTERAÇÕES DO NÊUTRON

Quando fora do núcleo atômico, os nêutrons são denominados “nêutrons livres”. Nêutrons livres são instáveis e possuem uma meia-vida um pouco maior que dez minutos, decaindo em um próton, um elétron e um neutrino [Duderstadt, 1979]. No entanto, nêutrons livres interagem intensamente com a matéria, dependendo sua velocidade e das características do nuclídeo em questão. As interações fundamentais são:

**Espalhamento Elástico Potencial** – Onde o nêutron interage com o núcleo atômico sem ser capturado por este. Desta forma, a energia cinética total do sistema se mantém a mesma, ainda que possa haver mudança no módulo e sentido de suas velocidades individuais. Assim, o nêutron pode atingir o núcleo que irá recuar, conservando o momento linear, porém, a soma das energias cinéticas no início é igual a soma no fim do processo.

**Espalhamento Elástico Ressonante** – Um nêutron com certa energia é capturado pelo núcleo e, momentos depois, o núcleo emite um nêutron com a mesma energia incidente, mas em outra direção. No espalhamento ressonante, não cabe definir se o nêutron incidente é ontologicamente o mesmo que o emitido, pois, na microescala, não há conservação de identidade dos constituintes. Portanto, todo nêutron teria comportamento equivalente.

**Espalhamento Inelástico** – No espalhamento inelástico, o nêutron é absorvido e a energia cinética do sistema não se conserva. Isso ocorre porque uma parte da energia do nêutron transmitida para o núcleo que fica em estado excitado. Este pode decair, emitindo um fóton, normalmente, na faixa da radiação gama. Além disso, ocorre a emissão do nêutron numa direção diferente e com menor energia. Este processo é um dos fundamentos da moderação de nêutrons no reator.

**Captura** – Nêutrons absorvidos podem ser capturados pelo núcleo sem ser reemitidos. Assim, o núcleo se transmuta num isótopo com número de massa  $A+1$ . Fótons também podem ser emitidos após a captura.

**Fissão** – O nêutron incidente é absorvido, mas causa uma instabilidade no núcleo, resultando na sua divisão. Por conseguinte, a fissão vem acompanhada da liberação de energia na forma de raios gama e energia cinética dos fragmentos. Além disso, pode haver emissão de novos nêutrons, especialmente na fissão de elementos pesados. No caso do Urânio-235, sua fissão gera em média 2,43 novos nêutrons.

A capacidade de um nuclídeo de interagir com nêutrons livres é mensurada por uma unidade física chamada sessão de choque microscópica, definida da seguinte forma: seja  $I$  a intensidade de um feixe de nêutrons uniformes e monodirecionais, onde tal intensidade é a taxa de partículas que atravessa uma unidade de área. Assim, se o feixe incide num alvo de espessura  $X$ , área  $A$  e contendo  $N$  átomos por unidade de volume, então, a taxa de interações  $T$  é linearmente proporcional à intensidade do feixe, à espessura, à área e à densidade do alvo, ou seja:  $T=I.N.A.X$ . Logo, a sessão de choque microscópica  $\sigma$  é a constante de proporcionalidade entre taxa de interações e  $I.N.A.X$ . A sessão de choque microscópica  $\sigma$  tem unidade de barns e é interpretada como a área aparente da secção transversal de um nuclídeo.

Nêutrons podem interagir de diferentes formas. Portanto, é conveniente descrever cada sessão de choque conforme a interação correspondente. Assim, a sessão de choque de fissão é  $\sigma_f$ , sessão de choque de captura é  $\sigma_c$ , a soma destas duas é chamada sessão de choque de absorção  $\sigma_a = \sigma_f + \sigma_c$ . A sessão de choque de espalhamento é representada como  $\sigma_s$ , assim, a sessão de choque total  $\sigma_t$  é dada pela soma das demais:  $\sigma_t = \sigma_f + \sigma_c + \sigma_s$ .

Nas aplicações cotidianas, é útil tratar as interações de nêutrons com unidades correspondentes a macroescala, onde alvos possuem dimensões na ordem do metro e uma quantidade de átomos na ordem do número de Avogadro. Assim, a sessão de choque macroscópica pode ser determinada como o produto entre o número total de núcleos num volume vezes a sessão de choque microscópica, resultando numa unidade do inverso da distância, ou usualmente é  $\text{cm}^{-1}$ . É possível demonstrar que a sessão de choque macroscópica representa a distância média que um nêutron atravessa o material sem ocorrer interação.



### 3 PROBABILIDADE DE ESCAPE

A despeito das diversas interpretações e sentidos para o termo probabilidade, neste trabalho, probabilidade esta associada à frequência esperada de um acontecimento de sistemas físicos aleatórios como, por exemplo, o decaimento átomos radioativos, a rolagem de dados ou, como no caso de interesse, com a chance de nêutron de escapar de um volume de controle. Em tais sistemas, certos eventos tendem a ocorrer com uma proporção persistente e, desta forma, a frequência de um evento, no longo prazo, pode ser determinada analiticamente por métodos matemáticos ou numericamente por simulações estatísticas.

Muitos livros textos definem a probabilidade de escape ou “probabilidade de fuga” como a proporção total de nêutrons que ultrapassam a fronteira do reator em relação aos nêutrons produzidos no mesmo. [Lamarsh, 1966]

Tal definição possui importância em certos contextos. No entanto, ela carece de generalidade quando se procura construir um campo de probabilidade de escape dependente de posição e energia do nêutron. Quando for necessário fazer referência àquela definição de livro texto, será utilizado o termo "probabilidade de fuga total clássica" cujo significado matemático é dado pela fórmula citada.

Neste estudo, o termo "probabilidade de escape de nêutrons" (PEN) será definida como a chance de um dado nêutron com velocidade e posição conhecida dentro do reator, localizar-se em qualquer momento futuro, fora dele e sem possibilidade de retorno. Atenta-se para o fato de que a "velocidade" pode ser ou o vetor ou a energia. No caso da velocidade como vetor, significa ter o conhecimento do módulo, direção e sentido do vetor velocidade inicial e, neste caso, a probabilidade de escape é calculada sabendo que, inicialmente, o nêutron tem uma direção preferencial. No entanto, também podemos ter a probabilidade de escape isotrópica, quando não se define direção inicial preferencial.

É importante ressaltar que por vezes a palavra velocidade em física nuclear se refere à energia do nêutron, sem necessariamente indicar direção que ele se desloca. Por exemplo, na geração de nêutrons por fissão, um núcleo pode se desintegrar emitindo um nêutron de energia conhecida, mas com deslocamento isotrópico. Assim, este segundo caso se enquadraria na probabilidade de escape isotrópica, pois o nêutron possui uma "rapidez", sem se saber qual sua direção inicial, mas se sabe que qualquer direção é igualmente possível. Ao longo desta dissertação, trabalha-se apenas com a probabilidade de escape isotrópica e, por simplicidade,

o termo "probabilidade de escape de nêutron" (PEN) será referente ao caso isotrópico quando não houver outra informação adicional.

Nota-se que, para os casos estudados, supõe-se que o limite do reator deve ser estendido até a última fronteira material onde é possível ocorrer espalhamentos sucessivos. Ou seja, o domínio total do reator não seria definido por qualquer volume de controle, mas sim, por aquele capaz de abranger todo material que o modelo contempla onde possam existir nêutrons capazes de se espalhar e, em última instância, escapar do reator. Portanto, uma vez que o nêutron ultrapasse o limite desta região material, considera-se que não existirá qualquer chance de retorno para a mesma. Assim, o nêutron atingiria a condição de escape.

A atenção com os pormenores desta definição se justifica pelo fato de que, no limite de tempo indo para infinito\*, um nêutron pode atingir apenas três condições finais: 1) ou ele será capturado no reator; 2) ou ele escapará; 3) ou ele causará fissão (no caso da fissão, nenhum dos novos nêutrons gerados carregará a identidade do nêutron "pai", logo, o nêutron pai atingiu a condição final de fissão). Sabendo que estas condições finais se tratam de eventos independentes e, além disso, são as únicas condições finais que um nêutron pode atingir, então, a soma de probabilidade das três condições resulta em "100%" ou "1". Esta propriedade será importante nos passos posteriores.

$$\text{Probabilidade de Escape} + \text{Condição Final de Fissão} + \text{Condição Final de Captura} = 100\% \quad (3.1)$$

Ressalta-se que outras abordagens com diferentes enfoques também permitiriam levar em conta mais condições finais. Por exemplo, todo nêutron livre possui uma meia vida associada, desta maneira, uma condição final de "decaimento" poderia ser considerada, levando em conta a chance de decair. Contudo, o ciclo de vida de nêutron no reator dificilmente dura mais que poucos segundos. Assim sendo, as únicas condições finais relevantes para o escopo deste trabalho são a de captura, a de fissão e a de escape. Qualquer outro evento terá virtualmente 0% de chance de ocorrer.

Em outras palavras, a consideração de tempo tendendo a infinito é relativa e permite que eventos que necessitam mais que alguns segundos para acontecer sejam descartados por uma questão de relevância e simplicidade. Entretanto, nada impede que outras aplicações utilizem diferentes condições finais. Esta consideração leva em conta a ampla gama de

aplicações que a física nuclear possui além da física de reatores. Por exemplo, em aplicações onde  $10^3$  segundos não possam ser considerados como "tempo tendendo a infinito", então, a condição de decaimento poderia ser uma condição final relevante.

Implicitamente, as definições adotadas para aplicação em reatores de potência carregam consigo importantes conceitos subjacentes. O primeiro é considerar que os limites externos do reator se comportam tal como um vácuo ideal que impossibilita o retorno daqueles nêutrons que escaparam. Esta é uma aproximação válida tendo em vista duas considerações:

A) A densidade da blindagem mais externa ao reator costuma estar a muitas ordens de grandeza acima da densidade do ar externo circundante.

B) Se a blindagem for constituída por elementos de elevada massa atômica, então, além da diferença de densidade, haverá também um comportamento reflexivo associado à conservação do momento linear. Isso porque qualquer nêutron oriundo do ambiente externo, quando incidir na blindagem, terá a tendência de ser refletido para fora durante uma colisão elástica com os núcleos pesados, dificultando ainda mais o retorno para o centro do reator.

Através de A e B se garante que a condição final de escape seja uma condição final independente da condição final de captura e de fissão, do contrário, haveria margem para que nêutrons escapassem e eventualmente retornassem ao reator causando absorção ou fissão, fazendo com que a mesma partícula fosse classificada em diferentes condições finais e, conseqüentemente, invalidando o princípio de independência entre estes eventos.

Outro conceito implícito, e um pouco mais abstrato, é o de atribuir a completa descrição do nêutron através de sua posição e energia conhecidas simultaneamente. Este conceito implica na simulação do nêutron como partícula, onde o comportamento ondulatório e seu respectivo comprimento de onda é irrelevante comparado com as dimensões do reator. Além disso, este conceito também abre novas questões quando se busca calcular a probabilidade de escape não de um ponto do reator, mas de uma região deste. Um debate mais profundo será feito ao longo do capítulo 3.

Escape e fuga são termos muitas vezes usados como sinônimos, dependendo do contexto empregado. Aqui, escape e fuga serão referentes às correntes de nêutrons direcionadas para fora fronteira do reator ou, em outras palavras, pela corrente dos nêutrons que atingem a condição de escape. Disto segue que, em qualquer momento de operação de um

reator, a variação da quantidade de nêutrons presente em seu interior será [Chaplin, Neutron Theory]:

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Taxa de variação} \\ \text{de nêutrons} \\ \text{no reator} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} \text{Produção por} \\ \text{Fissão} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Perda por} \\ \text{Absorção} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Perda por} \\ \text{Fuga} \end{array} \right] \quad (3.2)$$

Classicamente, a taxa de produção de nêutrons pode ser localmente estimada sabendo-se a sessão de choque de fissão macroscópica, além do fluxo de nêutrons e do número de nêutrons formados por cada fissão. Já a taxa de absorção depende da sessão de choque de absorção macroscópica e do próprio fluxo. Porém, a fuga resulta de sucessivos espalhamentos com uma grande árvore de possibilidades que nêutrons de diferentes energias podem tomar conforme sua posição no reator. Logo, o conhecimento da PEN contribui para o aperfeiçoamento da formulação.

A PEN tem propriedade local na forma de um campo escalar. Cada energia do espectro possui um mapa de probabilidades cujos valores variam entre 0 e 1 correspondendo a chance de fuga do nêutron com aquela determinada energia naquela determinada posição. Tal estudo se assemelha à classe problemas matemáticos de "*randon walk*". O *randon walk* consiste prever qual a posição provável de uma partícula que possui um deslocamento randômico de PDF conhecida, executando um determinado número de "passos". Alguns poucos casos particulares de *randon walk* possuem soluções analíticas, sendo estes problemas muito mais simples que os sucessivos espalhamentos de nêutrons num reator. Sendo assim, estimativas numéricas ainda constituem o caminho viável para estimar a PEN de forma satisfatória.

Estatísticas numéricas, quando voltadas ao cálculo da PEN, exigem a construção de um *grid* ou a divisão do espaço em secções de volume onde a probabilidade será atribuída. Para certos casos, é conveniente unir estas secções em macrorregiões, especialmente se a amostra não for o suficientemente grande. Observa-se que o caso particular de uma macrorregião envolvendo todo o volume do reator corresponde ao exato caso de "probabilidade de fuga total clássica" citado anteriormente.

No problema estudado nesta dissertação, escolheu-se dividir o reator em macrorregiões concêntricas e subdividir o espectro em grupos. Do contrário, haveria um grande custo computacional para formar uma estatística precisa num *grid* e espectro muito

refinado. Ou então, o *grid* teria pontos vazios ou sujeitos a fortes flutuações. No entanto, esta escolha por macrorregiões tem implicações quanto a metodologia. Isto porque a PEN foi definida como a chance de fuga de um nêutron com velocidade e posição conhecidas. Porém, quando a PEN se refere a uma macrorregião de um nêutron numa faixa do espectro, abre-se margem para executar diferentes abordagens.

Deve-se, antes, esclarecer que uma análise estatística que divide o espectro em grupos não implica simular o reator usando grupos de energia. Por exemplo, nêutrons de 1 e 2 MeV, podem ser simulados usando cada qual as seções de choques e propriedades físicas correspondentes a suas energias. Entretanto, é possível compor uma estatística de um grupo de energia que abrange a faixa de 1 a 2 MeV. Ou seja, a simulação é realizada de forma contínua no espaço e na energia. Por outro lado, a estatística conta apenas a proporção de nêutrons que escaparam do reator, levando em conta que eles são oriundos de uma macrorregião e de uma faixa do espectro.

A principal razão para usar as macrorregiões é auxiliar a estatística e o pós-processamento de dados. Todavia, isto trás consigo conseqüências relacionadas à própria definição de probabilidade de escape, tendo em vista que ela foi definida como sendo a chance de escape de um nêutron com velocidade e posição conhecida. Ou seja, se a velocidade deste nêutron se encontra numa faixa de energia e sua posição é uma macrorregião do reator, então é importante estabelecer as condições desta análise.

Análise estatística do escape deve levar em conta: a condição inicial da amostra, a região espacial, temporal e faixa do espectro a qual será atribuída uma probabilidade de escape, além da condição final que a amostra atinge para definir qual fração da população sofreu escape. É importante que todos estes fatores sejam estatisticamente independentes. Ou seja, não pode haver sobreposição entre as regiões espaciais ou do espectro, assim como a amostra deve ser inicialmente definida, com grupos estatísticos claros de forma tal que a migração de nêutrons entre diferentes posições e energias com *down scattering* não se sobreponham na contagem e “contaminem” os diferentes grupos estatísticos iniciais. Por fim, as condições finais precisam ser independentes como já explicitado.

Por exemplo, nesta dissertação foi realizada uma estatística de escape utilizando o momento da fissão como condição inicial para cada unidade da amostra de nêutrons. Por conseguinte, a probabilidade de escape só pode ser definida para regiões onde existe material físsil, pois regiões sem enriquecimento não ocorre fissão e, portanto, não havia unidades de

amostra para realizar a estatística. Logo, a amostra de interesse se constituiria de todos os nêutrons nascidos por fissão, numa determinada região, com uma determinada faixa de energia, enquanto o reator opera num regime subcrítico. Se um nêutron nascer com 4 MeV e, após sucessivas interações, escapar com 0,5 MeV, deve-se tomar o cuidado de não “contaminar” esta contagem com a estatística do grupo de nêutrons que nasceu com 0,5 MeV e escapou sem mudar de energia. Contudo, esta é apenas uma das muitas formas de se realizar uma estatística independente.

Não esta no escopo deste estudo definir todas as formas de se realizar estatísticas de escape, mas é importante ressaltar que diferentes considerações podem gerar diferentes probabilidades de escape. Por exemplo, existe uma diferença fundamental entre analisar qual seria a probabilidade de escape de um dado nêutron considerando que ele pode estar inicialmente em qualquer ponto de uma região e pode ter qualquer energia numa faixa do espectro. Outra análise da probabilidade seria determinar qual a proporção de nêutrons de uma faixa de energia oriundo de uma região escapam do reator quando este opera numa determinada condição. Ambas as formas de cálculo serão descritas a seguir, a primeira delas será chamada de probabilidade de escape extrínseca (PEE), pois esta segue condições teóricas impostas. Já aquela última será chamada probabilidade de escape intrínseca (PEI), porque carrega consigo propriedades inerentes do sistema.

A probabilidade de escape extrínseca (PEE) corresponderia à chance de fuga atribuída a uma região do reator e a uma faixa do espectro, calculada de maneira que a densidade de nêutrons é previamente conhecida ou imposta. Ou seja, determina-se uma região espacial do reator para onde a PEE será estimada. Então, seleciona-se uma faixa do espectro, determinando a distribuição da densidade de nêutrons dessa faixa do espectro naquela região espacial. Assim, o cálculo da PEE deve responder qual relação de nêutrons que escaparam do reator dado que eles estavam naquela faixa de energia e naquela região, cumprindo uma distribuição proporcional a da densidade imposta.

Já a probabilidade de escape intrínseca (PEI) corresponde à chance de fuga atribuída a uma faixa do espectro de uma região do reator em seu estado de operação. Assim, estatística da fuga é calculada fazendo a contagem da proporção de nêutrons oriundos daquela região que atingiu a condição final de escape quando o reator operava num determinado estado. Ou seja, a densidade de nêutrons não é previamente conhecida ou imposta, a densidade

corresponde a de operação do reator. Assim, o cálculo da PEI carrega consigo características intrínsecas do sistema.

Neste contexto, o estado do reator se refere a diferentes configurações operacionais capazes de alterar o mapa de densidade ou a corrente no seu interior. Por exemplo, um mesmo reator pode estar num regime ou transiente, ou permanente, crítico, ou supercrítico ou subcrítico, além de diferentes combinações de temperaturas. Desta forma, deve-se levar em conta qual estado o reator se encontra para o cálculo da PEI de uma determinada região. Logo, qualquer alteração física capaz de alterar a densidade e corrente de nêutrons num reator, como, por exemplo, temperatura ou criticalidade, corresponderá a um novo estado de operação e possuirá uma nova PEI para aquela mesma região.

Talvez seja possível que um reator, operando num estado específico, possua os mesmo valores de PEE e PEI para uma região  $dV$ , numa faixa de energia  $dE$ , desde que  $dV$  e  $dE$  sejam suficientemente pequenas. No limite, se a posição de um nêutron é plenamente conhecida, bem como seu vetor velocidade, então é a probabilidade de escape provavelmente seja convergente para um valor único absoluto. Contudo, quando a posição de interesse é uma macrorregião espacial, enquanto a velocidade não é um vetor, mas sim, uma faixa do espectro, então, diferentes considerações estatísticas podem encontrar diferentes valores para o escape.

No presente trabalho, foi realizada uma estatística intrínseca, ou seja, a estatística é feita observando o estado natural de operação de um reator que, neste caso, é subcrítico. A amostragem de nêutrons parte de sua origem na fissão. Portanto, a estatística de escape responde a seguinte pergunta: “*dado que o nêutron surgiu da fissão na região  $dV$  e dentro da faixa de energia  $dE$ , durante a operação natural do reator, então qual a probabilidade dele se encontrar, em qualquer momento futuro, fora do contorno?*”

Os pormenores quantitativos desta metodologia são discutidos no capítulo 5.3 aplicado a um caso de estudo de reator retangular heterogêneo. Contudo, a enfatiza-se que outras análises também podem ser formadas respondendo diferentes perguntas.

## 4 MÉTODO DE MONTE CARLO

### 4.1 Método de Monte Carlo Físico e suas Características

O método de Monte Carlo (MMC) consiste numa ampla classe de métodos para resolver problemas ou realizar simulações através de geradores aleatórios. Shonkwiler et al. compartilha uma visão semelhante, definindo os métodos de Monte Carlo como um conjunto de técnicas de modelagem de fenômenos, empregando algoritmos com geradores de números randômicos. Shonkwiler et al. refere-se aos "métodos" Monte Carlo no plural devido à existência de diversas subcategorias distintas que, em seus fundamentos, possuem o mesmo princípio de analisar um problema aplicando um conjunto randômico de valores.

Ainda que seus conceitos gerais fossem conhecidos séculos antes, o Monte Carlo moderno se desenvolveu com o início da computação e da física nuclear. Inicialmente, foi um dos meios básicos de atacar problemas com muitos graus de liberdade e que, até então, não possuíam outra forma eficaz de solução. Este ainda é o caso da Equação de Transporte de Nêutrons.

O método de Monte Carlo moderno foi concebido e batizado por Stanislaw Ulam e John von Neumann no fim da década de 1940. Na época, sua pesquisa era conduzida no Laboratório de Los Álamos e tinha caráter secreto, sendo a palavra "Monte Carlo" um codinome referente a um cassino do Principado de San Marino. Mais tarde, Ulam expandiu e divulgou o método, inspirando pesquisas subseqüentes.

O método de Monte Carlo é dividido em duas categorias. A primeira é o chamado Monte Carlo matemático que usa geradores aleatórios para solucionar integrais ou equações com coeficientes fixos. Porém, no caso de sistemas descritos por uma dinâmica estocástica, então o método é chamado Monte Carlo físico. Assim, a Equação de Transporte pode ser abordada pelo método de Monte Carlo matemático, desde que o gerador aleatório busque resolver a equação integro-diferencial que, por si mesma, descreve apenas densidades médias e não flutuações probabilísticas. Porém, caso se use o Monte Carlo Físico, o transporte de nêutrons é simulado calculando as chances de cada partícula interagir com a matéria, conforme sua sessão de choque, sendo esta a metodologia adotada nesta dissertação.

Como explicitado na introdução deste trabalho, existem diferenças fundamentais entre métodos "numéricos determinísticos" e métodos "numéricos estocásticos" como o MMC



físico. De forma geral, os primeiros consistem em discretizar o domínio para, então, aplicar algoritmos de cálculos conforme as equações e condições de contorno que regem o fenômeno. Já o MMC físico não demanda de uma equação governando o sistema, mas é necessário que suas iterações fundamentais possuam uma PDF conhecida. Uma vez em posse da PDF, geram-se valores randômicos conforme a PDF, então, aplica-se a série de algoritmos para formar uma resposta ou “história”. Desta maneira, são realizadas muitas simulações, compondo um conjunto de "histórias" estatisticamente relevante.

Certamente, o método de Monte Carlo físico é uma técnica conceitualmente simples para atacar problemas complexos. No entanto, não é menos verdade que erros em simulações mal empregadas podem, por vezes, ocorrer sem que o operador as perceba. Brandimarte (2014) lista as seguintes fontes principais de falhas na aplicação do MMC:

1. Concepção incorreta do modelo: por uso de uma PDF imprecisa, por omissão de algum fator de risco, por parâmetros mal estimados ou, por fim, pela natureza desconhecida do fenômeno, dificultando sua representação.
2. Geração de simulações insuficientes ou, então, a variância da PDF é muito mais ampla que as amostras ou valores randômicos.
3. Existência de erro sistemático na geração de estimativas, podendo estar abaixo ou acima do verdadeiro.
4. Formação do conjunto de histórias que discretiza variáveis de modelos exclusivamente contínuos, induzindo ao erro.
5. Gerador randômico viciado.
6. Existência de um *bug* no programa ou erro na implementação do algoritmo.

Parte desta lista consiste de erros conceituais fora do alcance do método, cabendo ao próprio especialista julgar se seu conjunto hipóteses e funções servem como base para uma simulação Monte Carlo. Assim, é importante notar que os resultados oriundos do MMC, ainda que corretamente programado, podem carregar vieses e erros do próprio modelo.

Em especial, percebe-se que as falhas 1 e 4 listadas por Brandimarte poderiam recair numa simulação de escape de nêutrons que utilizasse dados de sessões de choque dividido por grupos ou aproximados por médias na energia. Aliás, mesmo simuladores contínuos, lendo

dados de arquivos com valores discretos, poderiam gerar resultados distintos dos de simuladores que resgam os mesmos dados interpolados por outras funções contínuas.

Desde o início de seu emprego, o Monte Carlo era visto por alguns, incluindo Ulam, como não apenas como um método numérico de solução, mas como também, um “experimento estatístico”. Entretanto, esta visão não é compartilhada por este trabalho. Aqui, a palavra “experimento” será unicamente empregada para se referir aos testes empíricos que buscam observar a “natureza”, enquanto o Monte Carlo será abordado como testes computacionais que buscam calcular ou simular algo.

A importância desta diferença conceitual reside no fato de que toda simulação, mesmo que bem executada, carrega as limitações do paradigma em que foram construídas. Assim, a simulação não deve servir de juízo final para a compreensão da natureza. Por outro lado, um experimento é (ou pretende ser) uma observação da natureza, onde toda imprecisão é atribuída a problemas de interpretação e instrumentação do observador. Além disto, os resultados dos experimentos são a fonte primária para falsear ou construir teorias que fundamentam simulações. Desta forma, não se pode reivindicar que uma simulação computacional tenha exatamente os mesmos atributos de um experimento empírico. Possivelmente, o equívoco nesta terminologia seja mais recorrente em ciências econômicas, onde o emprego do MMC serve para formular teorias financeiras, não raro os denominando de “Experimento Monte Carlo”.

O método de Monte Carlo pode ser aplicado a todo sistema cujas interações fundamentais sejam descritas por uma função densidade de probabilidade (*Probability Density Function* – PDF). A formulação da PDF deriva de modelos teóricos construídos a partir de experimentos físicos de laboratório ou por observações da natureza, podendo carregar os mesmos erros conceituais que a “observação” e/ou o “modelo” venham a possuir. Por exemplo, pode-se usar MMC para simular a rolagem de um conjunto de dados de seis faces ou, também, para simular o decaimento de uma fonte radioativa. Para tanto, é necessário definir qual a PDF de cada um desses sistemas. Para os casos citados, poderia se definir que a PDF da rolagem de um dado de seis faces é 1/6 de chance para cada face ou, da mesma forma, que a PDF da desintegração de uma fonte radioativa segue a lei da constante de decaimento. Assim, a simulação de uma rolagem de dados, bem como a simulação do decaimento, é um mero constructo erguido sobre hipóteses idealizadas da experimentação e observação, sendo a própria experimentação a fonte para falsear qualquer teoria, nunca a simulação.

O método de Monte Carlo realiza operações sobre uma componente aleatória. Portanto, qualquer solução assim gerada forma um conjunto de dados que, em última instância, esta sujeita a flutuações. Desta forma, a validade de uma solução por Monte Carlo passar por uma análise estatística, apresentando um erro associado ao tamanho da amostra e à variância da PDF.

Para uma simulação por Monte Carlo com amostra de tamanho "n", a precisão da resposta será proporcional a  $n^{-1/2}$ . Desta forma, problemas com poucas dimensões são, em termos computacionais, melhor calculados pelos métodos numéricos determinísticos, pois, quando estes possuem ordem k, sua velocidade de convergência é equivalente a  $M^{-k/d}$ , onde "M" é o número de discretizações e "d" o número de dimensões. Portanto, o Monte Carlo costuma ser vantajoso para casos com elevado número de dimensões, visto que sua precisão independe de seu aumento, enquanto os demais métodos sofrem a ação do expoente "d" da expressão anterior. Para Santoro (2001), o Monte Carlo é eficaz em problemas que respeitam a desigualdade  $d > k$ .

O erro estatístico no Monte Carlo depende também da variância da PDF específica e do número de pontos aleatórios para os quais a função foi calculada. O caminho primário para diminuir o erro é aumentar "n", pois como visto, o erro é proporcional a  $n^{-1/2}$ . Contudo, esta opção se limita pelo tempo e capacidade computacional. Um meio seria compor um gerador randômico capaz de formar valores distribuídos tal como exigido pela PDF, evitando assim algumas etapas do algoritmo. Outra via é formar um vasto banco de dados com valores da inversa da função de interesse, acessando-o com qualquer gerador randômico linear. Uma relação de outros métodos é apresentada nas referências [Thijssen, 1999; Woolfson, 1999; Hartmann, 2002].

## **4.2 Simulação do Transporte de Nêutrons por Monte Carlo**

De forma geral, o Monte Carlo físico do transporte de nêutrons pode ser simulando através um gerador de números aleatórios que determina qual interação o nêutron fará em cada passo de sua trajetória. Assim, sabendo posição, direção e energia iniciais do nêutron, utiliza-se um valor randômico para determinar a distância percorrida por ele e a interação realizada no fim deste passo, conforme as sessões de choque do material. Desta maneira, o nêutron possuirá uma nova posição, direção e energia, recomeçando o processo.

O nêutron realiza dezenas de interações até ocorrer alguma das três condições finais: escapar, ser absorvido ou causar fissão. Denomina-se como a "história" do nêutron todo o caminho percorrido, indo desde seu "nascimento" até sua condição final. No caso da condição final de fissão, "nascerão" novos nêutrons a ser simulados e, sucessivamente, após acumular um conjunto de milhares de histórias, é feita uma estatística sobre comportamento do sistema.

Por exemplo, se um nêutron com energia  $E$  sofrer uma interação no ponto  $r$ , determina-se as probabilidades de captura, fissão ou espalhamento. Estas chances são proporcionais às respectivas seções de choque. Logo, a probabilidade de absorção  $p_c$  é igual a seção de choque de captura sobre seção de choque total, o mesmo para a probabilidade de fissão  $p_f$  e espalhamento  $p_s$ :

Estes eventos são as únicas possibilidades de interação e são independentes entre si, onde  $p_c+p_f+p_s=1$ . Portanto, um gerador linear lança um valor aleatório  $x$  entre 0 e 1 que é usado para aferir qual evento ocorreu. Se  $x$  esta entre  $0 \leq x < p_c$ , então ocorre capuro, se  $p_c \leq x < (p_f+p_c)$  ocorre fissão, porém, se  $(p_f+p_c) \leq x \leq 1$ , ocorre espalhamento.

Logo, os eventos seguem as mesmas probabilidades físicas indicadas pelos dados experimentais. Se ocorrer a absorção do nêutron, então ele atingirá a condição final de absorção e sua história termina. Se ocorrer espalhamento ou fissão, então uma nova "rolagem" probabilística é feita. Este segundo valor indicará como será o espalhamento ou fissão, segundo as condições experimentais destes fenômenos.

No caso da fissão, serão determinados quantos nêutrons nascerão e o nêutron pai atingirá a condição final de fissão e sua história terminará. No entanto, será iniciada a simulação de seus nêutrons "filhos". Já no caso do espalhamento, a história somente chegará a um final caso o neutro termine este deslocamento fora do contorno do reator, do contrário, o ciclo se reiniciará, executando uma nova interação. Estes eventos são as únicas possibilidades de interação e são independentes entre si, onde  $p_c+p_f+p_s=1$ .

Esta é uma visão geral compartilhada por inúmeros simuladores Monte Carlo. Cada qual possui sua particularidade, especialmente no "tracking" dos nêutrons, pois alguns códigos são voltados para a simulação temporal de todo o sistema, rodando o reator "segundo a segundo". Já outros seguem o processo "nêutron a nêutron", simulando cada nêutron em paralelo e, por fim, realizando a sobreposição final dos efeitos das histórias individuais. Além disso, os códigos são muito distintos ao implementar geometria, materiais, ciclo de

combustível, árvores de comandos, leitura de arquivos por bancos de dados interpolando ou por funções parametrizadas, entre outras incontáveis estratégias.

Sem explicitar aqui a enorme diferença entre os paradigmas de programação, vale ressaltar também que alguns códigos são específicos para certas aplicações que alteram sua dinâmica geral. Entre simuladores estocásticos mais reconhecidos no campo nuclear estão: GEANT [Agostinelli et al., 2003] utilizado pelo CERN para pesquisas físicas desde 1993, KENO [Petrie e Cross, 1975], MCBEND [Cowan, 2013] voltado especialmente para dosimetria, MCNP [Team 2003] desenvolvido pioneiramente em Los Álamos em 1957 e aperfeiçoado desde então para analisar criticalidade e segurança, OpenMC [Romano e Forget, 2013] desenvolvido no MIT, o finlandês Serpent [Leppänen, 2013] e o TRIPOLI [Both, 2003] voltado para problemas de transporte de nêutrons e emissão gama acoplados. Por fim, cita-se o programa Continuo desenvolvido nesta universidade [de Camargo, 2011] com o objetivo de forma um algoritmo eficiente para simulação de reatores usando parâmetros contínuos. Até o ano de 2016, o Continuous se encontrava em fase experimental, entretanto, foi utilizando como meio qualitativo para realizar as estatísticas de fuga devido a eficiência de seu código que permitia realizar largas estatísticas com parâmetros contínuos.

## 5 CASO DE ESTUDO DE PROBABILIDADE DE ESCAPE

### 5.1 Caso de Estudo

Escolheu-se o programa Continuous para simular um reator de geometria retangular com o objetivo de realizar a estimativa de probabilidade de escape de nêutrons. O programa Continuous foi desenvolvido por Dayana de Camargo [de Camargo, 2011] e [de Camargo, 2013] e aperfeiçoado por Luiz Felipe Barcellos [Barcellos, 2016]. Seu código foi desenvolvido em C++ para efetuar o transporte em três dimensões através do Método de Monte Carlo físico, usando funções parametrizadas para sessões de choque contínuas na energia. Ainda que o programa se encontrasse em fase de desenvolvimento, ele possuía vantagens comparativas, especialmente devido a sua grande rapidez de processamento, além de possuir licença aberta e *feedback* com seus desenvolvedores.

O programa sofreu ligeiras mudanças no código para efetuar a contagem dos neutros e seu *tracking* desde a fissão até a fuga. Detalhes sobre sua operação serão desenvolvidos no capítulo 5.3 e 5.4, enquanto o capítulo 5.2 será dedica a descrever a história do desenvolvimento do Continuous e suas características.

### 5.2 Programa Continuous

O Continuous foi desenvolvido inicialmente por Dayana de Camargo, 2011, em sua tese de doutorado. A versão inicial do programa consistia num bloco retangular com apenas duas regiões homogêneas. As sessões de choque parametrizadas na sua simulação contemplavam U-235, U-238, O-16 e H-1, sendo que estes os elementos químicos podiam ser combinados em diferentes proporções em cada uma das regiões homogêneas.

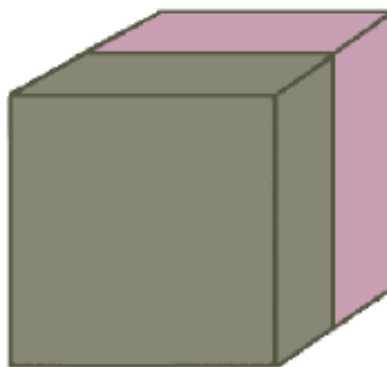


Figura 5.1 – Reator ideal da primeira versão do Continuous simulado por Camargo, 2011.

O Continuous simula nêutron a nêutron no reator, onde cada partícula realiza uma interação no meio material em cada passo Monte Carlo. As três interações básicas são espalhamento, captura e fissão, e tanto sua probabilidade de ocorrência, quanto as distâncias percorridas no meio material, seguem o princípio do MMC físico descrito no capítulo 4.

A figura (5.3) mostra o fluxograma da versão 2011 do Continuous. Ele tem como condição inicial uma distribuição aleatória do nêutron dentro do reator seguindo o espectro de energia de fissão. Após determinar qual posição e energia inicial, o programa verifica se a partícula se encontra no domínio. Caso negativo, ocorre fuga e a história do nêutron termina. Caso positivo, então programa verifica qual região em que o nêutron se encontra e realiza aleatoriamente uma das três interações. A partir disto, o nêutron ganhará uma nova energia e posição em caso de espalhamento, ou será capturado (e a história acaba) ou causará fissão gerando novos nêutrons.

A versão aperfeiçoada por Barcellos, 2016, utiliza os mesmos princípios de MMC físico e os mesmos dados de seção de choque. Contudo, o reator possui uma geometria mais complexa, constituído de três regiões retangulares concêntricas, homogêneas. O fato de o nêutron poder atravessar mais de duas regiões material distintas também demandou ajustes no algoritmo. A versão 2016 conta com um gerador randômico mais amplo, além de outras características que serão abordadas.

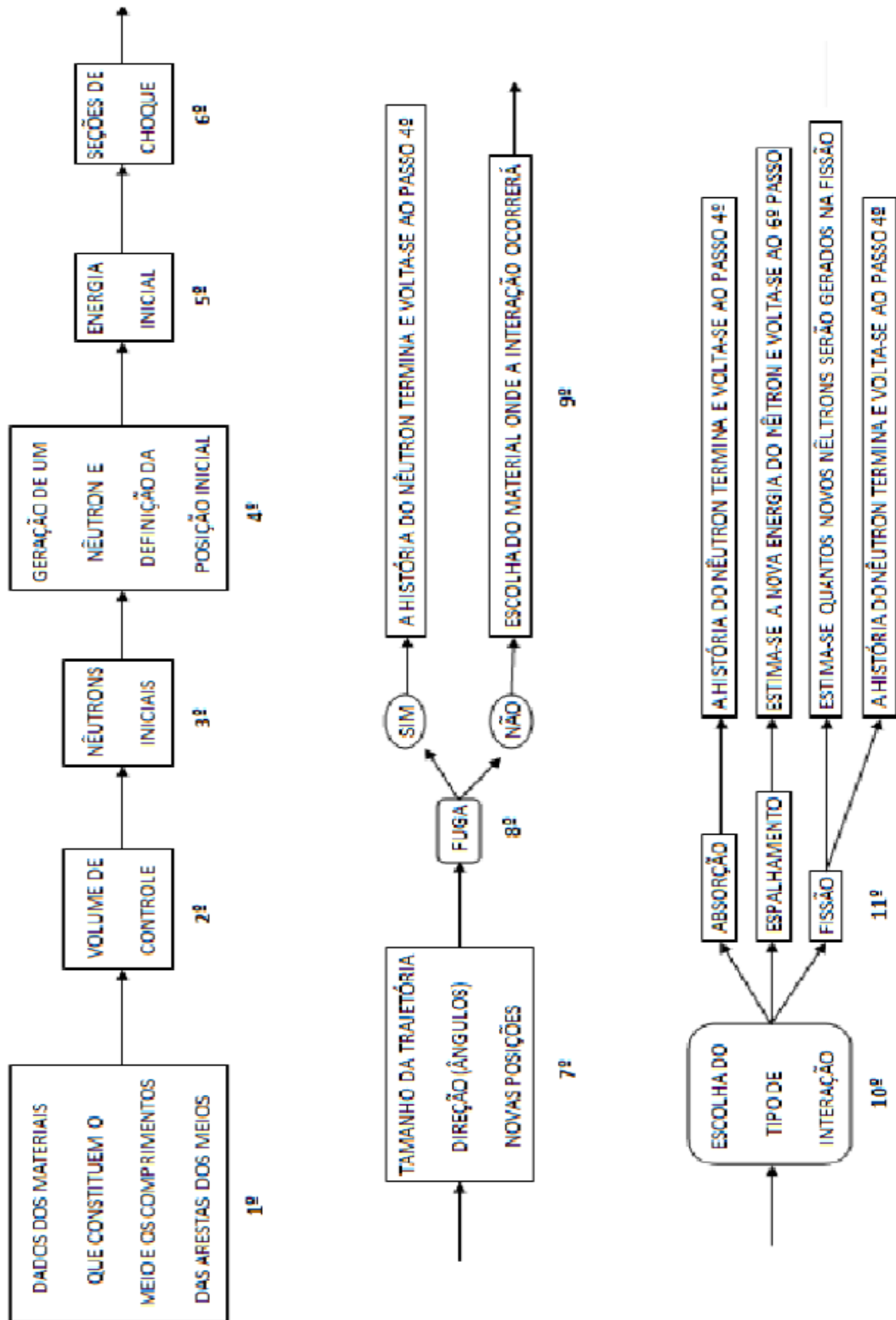


Figura 5.2 – Fluxograma do Continuous de Camargo, 2011.



O presente trabalho utilizou a versão de Barcellos como base para determinar a probabilidade de escape. Para tanto, o programa sofreu alterações. Primeiro, o reator foi subdividido em cem camadas. Nelas foram feitas as contagens de posição e energia inicial dos nêutrons oriundo da fissão nestes locais. Além disso, o código passou a registrar energia final, ângulo de saída final e posição final dos nêutrons quando ocorria fuga. Por fim, acrescentaram-se algoritmos de cálculos estatísticos que serão discutidos na secção 5.4 e seus resultados no capítulo 6.

O Continuous permite gerar algo na ordem de  $10^6$  histórias de nêutrons em algumas horas de operação. Isto é um fator importante para realizar as estatísticas de escape, visto que o núcleo de um reator real não costuma ter um fluxo de escape maior que 1% do fluxo do núcleo interno. Portanto, uma estatística precisa demanda uma grande quantidade de amostras para registrar variações menores que 1% na probabilidade de fuga. Mesmo que não fosse possível simular casos físicos reais, o Cotinuous foi escolhido como ferramenta para testar as hipóteses qualitativas desenvolvidas no capítulo 3 e verificar as características da fuga de nêutrons.

A versão do Continuous de Barcellos, 2016, permitia definir três regiões quadradas concêntricas homogêneas, sendo elas compostas por quaisquer combinações volumétricas de U-235, U-238, O-16 e H-1. Suas sessões de choque foram parametrizadas por funções na faixa de 0 a 20 Mev com erro menor que 5%. Apenas o U-235 possuía função parametrizada para seu espectro de fissão induzida.

O caso proposto consiste num reator na forma de um bloco retangular. Sua secção transversal é quadrada medindo 200cm x 200cm e sua altura é de 1000cm. A condição de contorno lateral é de vácuo. Já o topo e base possuem condições reflexivas, ou seja, nêutrons que saem pelo topo, em  $z > 1000$ , são inseridos novamente pela base, mantendo os mesmos ângulos, coordenadas x, y e energias anteriores (atualizando apenas a posição z). O mesmo se aplica para nêutrons que saem pela base em  $z < 0$ . Foram simulados um total de 5000 passos Monte Carlo.

A largura do reator foi deliberadamente escolhida para ser estreita, de maneira que as fugas fossem freqüentes e registradas com facilidade. Já a altura em si não afetaria o problema em termos matemáticos, visto que, se a condição de contorno é reflexiva, então é indiferente limitar o reator por qualquer outra medida (como 100cm ou 10cm). Contudo, como o intuito do problema é gerar estatísticas de fuga, percebeu-se que um reator com baixa altura poderia

registrar o caso de nêutrons que, ao se aproximar das arestas inferiores e superiores, poderiam estar antes do escape numa altura de  $z = 0,01\text{cm}$  e, após o escape, numa altura  $z = 999,9\text{cm}$ . Logo, as estatísticas do vetor deslocamento se contaminariam por esta diferença abrupta de posição. Assim, escolheu uma altura de  $1000\text{cm}$  a fim de evitar esta possibilidade e, levando em conta que o deslocamento de nêutrons é na ordem de milímetros, qualquer deslocamento na ordem de metros se destacaria e seria facilmente corrigido na série de dados.

O reator é composto por três regiões homogêneas, quadradas e concêntricas. A Região-1, também chamada de núcleo, possui  $160\text{cm} \times 160\text{cm}$  de lado e contém uma mistura homogênea de água e dióxido de urânio enriquecido a  $0,735\%$ . Este grau de enriquecimento foi escolhido porque, através dele, a população de nêutrons era decrescente para um número de passos suficientemente longos. Além disso, considerou-se que  $25\%$  do volume interno do núcleo é formado de dióxido de urânio. Em termos operacionais, isto significa que  $25\%$  das interações dos nêutrons nesta região são com dióxido de urânio, enquanto  $75\%$  são com água, sendo estes detalhes explicitados no capítulo seguinte.

A Região-2 é a do moderador, correspondendo a um anel quadrado de  $10\text{cm}$  de espessura que envolve o núcleo. A Região-2 é composta exclusivamente de água. Ela se inicia em  $160\text{cm} \times 160\text{cm}$  e se estende até  $180\text{cm} \times 180\text{cm}$ . Por fim, o reator é cercado pela Região-3 que consiste numa blindagem de  $10\text{cm}$  de espessura. Ela se estende de  $180\text{cm} \times 180\text{cm}$  até  $200\text{cm} \times 200\text{cm}$ . A blindagem representaria uma combinação de óxido de urânio exaurido e água. O óxido de urânio corresponde a  $45\%$  do volume e contém um enriquecimento residual de  $0,1\%$ . A figura (5.3) apresenta um esquema da secção transversal do reator com vista de topo.

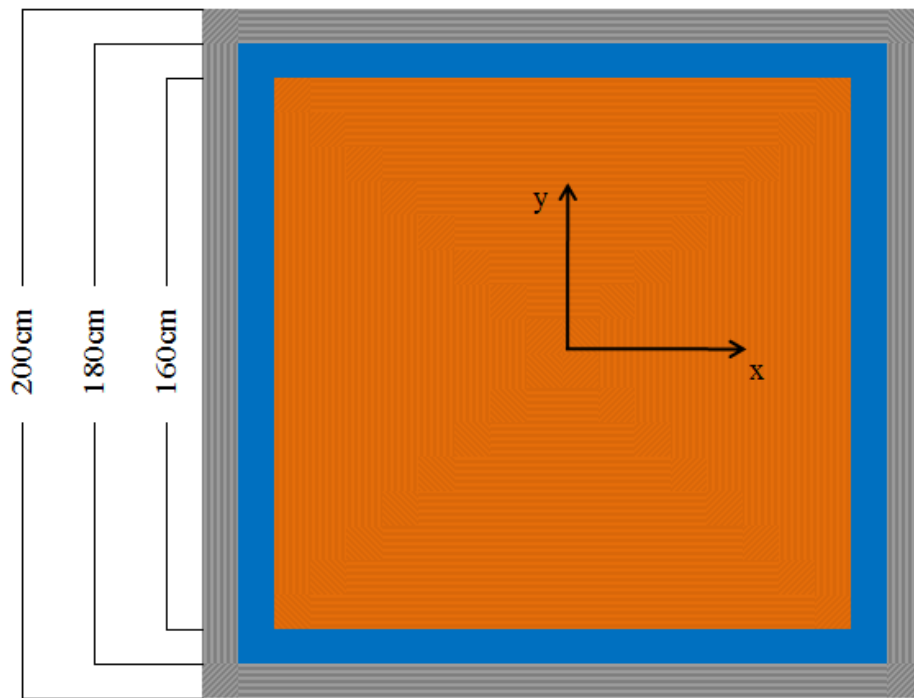


Figura 5.3 – Seção transversal do reator. A Região-1 corresponde a área laranja, a Região-2 é o moderador em azul, já a Região-3 é a blindagem representada em cinza.

A condição inicial do reator é uma distribuição uniforme de nêutrons no interior da Região-1, onde suas energias seguem o espectro de fissão do U-235. Já os ângulos azimutal  $\varphi$  e zênital  $\theta$  são determinados randomicamente de  $[0, 2\pi]$  e  $[-\pi/2, \pi/2]$  radianos, respectivamente.

O Continuous foi desenvolvido com objetivo de simular o transporte tridimensional de nêutrons através do MMC físico. Assim, cada nêutron individual realiza uma interação por passo, onde as distintas interações ocorrem conforme as sessões de choque do meio material em que ele se encontra, resultando em absorção, fissão ou espalhamento conforme já explicitado.

No início de cada passo, o programa verifica se há nêutrons recém oriundos de fissão. Estes nêutrons receberão dois números aleatórios, o primeiro serve para definir seu ângulo zênital  $\theta$  que varia entre  $[-\pi/2, \pi/2]$  radianos, já o segundo é o ângulo azimutal  $\varphi$ , este último variando entre  $[0$  e  $2\pi]$  radianos. Em seguida, os nêutrons oriundos da fissão recebem um valor para sua energia, seguindo a PDF da distribuição de fissão do U-235, indo de 0 a 20 Mev. Além disso, eles herdam como posição inicial as mesmas coordenadas onde ocorreu a fissão de seu nêutron pai. Já os demais nêutrons que não surgiram de uma fissão neste passo,

iniciam o algoritmo com os mesmos valores de ângulos, energia e posição obtidos nos cálculos finais de seu passo anterior.

Em seguida, o programa define uma nova distância  $L$  de deslocamento, dependendo inicialmente destes seis valores iniciais – os dois ângulos, as três coordenadas espaciais e a energia. Assim, atualiza-se a coordenada espacial com a nova posição do nêutron, detalhes deste processo de deslocamento  $L$  serão dados mais adiante. Em seguida, o programa avalia se o nêutron ainda esta dentro dos limites do reator. Se a resposta for não, o nêutron atingiu a condição final de escape e seus dados são salvos e sua história termina. Se a resposta for sim (“ainda esta no reator”), então, o programa usa um gerador randômico para definir qual das três interações ocorreu: absorção, espalhamento ou fissão, conforme as sessões de choque do material da região onde o nêutron se encontra.

Tanto a distância percorrida como a interação são determinados de forma estocástica, conforme a física do problema. A partir deste ponto, o Continuous cumpre o seguinte protocolo: no caso de absorção, a história termina e os dados são registrados. No caso de fissão, a história do nêutron pai termina, mas se iniciará a história de novos nêutrons no próximo passo (o número de “filhos” gerados segue a PDF de emissão média de 2,42 nêutrons por fissão). Por fim, se ocorrer espalhamento, o programa efetua uma seqüência de operações para definir novos ângulos e energia, conforme a física de espalhamento que depende, em especial, da massa atômica do elemento que interagiu com o nêutron. Detalhes sobre o espalhamento serão dados mais adiante, mas estes novos valores de ângulos e energia serão herdados no inicio do passo seguinte.

O algoritmo garante que o nêutron no reator sempre efetuará uma interação em cada passo. Por conseguinte, este procedimento possui a vantagem de nunca armazenar posições ou dados sem uso efetivo, fazendo com que o programa se torne mais eficiente. Contudo, o passo de cada nêutron possui uma duração de tempo específica, ou seja, a escala de tempo é única para cada nêutron.

Por exemplo, os três primeiros passos de dois nêutrons originários da mesma fissão podem ter durações distintas, mesmo que tenham surgido no mesmo instante. Isso porque o primeiro nêutron pode nascer com 5 MeV e interagir três vezes num intervalo de 6 microssegundo, enquanto o outro nêutron pode nascer com 1eV e efetuar três interações num tempo de 1 segundo. Ambos os cálculos foram efetuados em três passos paralelos. Contudo, os valores de tempo dependem da energia e da distância percorrida por cada nêutron.

Computacionalmente, a eficiência nos cálculos vem acompanhada de uma dificuldade para recompor a sincronia de todas as histórias do reator. Para tanto, é necessário reconstruir os diferentes passos temporais de cada nêutron, algo que pode ter um elevado custo de pós-processamento.

Sobre a determinação da distância percorrida em cada passo, ela depende da posição no início do passo, das duas direções angulares, da energia e da sessão de choque macroscópica no meio onde o nêutron se encontra. A partir destes dados, a distância percorrida  $L$  será igual a um valor real  $S$  vezes o meio caminho livre  $1/\Sigma t$  do nêutron. Para determinar  $S$ , o programa gera um valor aleatório  $A \in [0,1)$ , calculando da seguinte forma:

$$S = -\ln(1 - A) \quad (5.2.1)$$

Desta maneira, o caminho percorrido  $L$  é igual a:

$$L = \frac{S}{\Sigma t} \quad (5.2.2)$$

A direção do deslocamento segue a orientação do vetor ortonormal  $\vec{\Omega}$ :

$$\vec{\Omega} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) \cdot \cos(\theta) \\ \text{sen}(\varphi) \cdot \cos(\theta) \\ \text{sen}(\theta) \end{pmatrix} \quad (5.2.3)$$

No caso do nêutron cruzar regiões compostas por materiais distintos, verifica-se qual proporção "pi" de  $S$  estava localizado em cada meio ponderado pelas respectivas sessões de choque. Assim, a distância  $L$  total será resultante do somatório:

$$L = \sum_i p_i \cdot S \cdot \frac{1}{\Sigma_{ti}} \quad (5.2.4)$$

Após realizar o deslocamento, escolhe-se o tipo de interação que nêutron vai realizar. Para tanto, deve-se determinar qual molécula vai interagir com o nêutron. A molécula é

escolhida randomicamente conforme a proporção volumétrica de cada substância em cada região. Portanto, se a região 1 do reator for composta 80% de água, haverá 80% de chance do nêutron interagir com a água. Em seguida, defini-se qual interação ocorrerá. Isto é feito gerando um novo valor randômico. Este valor é comparado com a chance ponderada de cada evento ocorrer, conforme a sessão de choque microscópica dos núcleos da molécula (segundo o mesmo princípio explicitado no capítulo 4.2).

Caso o evento selecionado seja espalhamento, o nêutron receberá uma nova energia e uma nova direção angular conforme os princípios físicos de espalhamento discutidos no capítulo 2. Efeitos anisotrópicos estão inseridos no código, levando em conta que, à medida que nêutrons de altas energias incidem sobre núcleos massivos, a conservação do momento linear afeta diretamente a direção preferencial do mesmo. Por outro lado, nêutrons térmicos possuem tendência de espalhar isotropicamente, principalmente nas colisões com núcleos leves de hidrogênio. Contudo, nêutrons de baixas energias estão sujeitos ao *up-scattering*, tendo em vista que se tornam prováveis colisões com núcleos de elevada energia cinética, já que estes últimos são afetados pelas altas temperaturas do interior do reator. Todos estes efeitos são levados em conta no algoritmo, considerando que as moléculas do meio seguem a distribuição de Maxwell-Boltzmann para uma temperatura de 568K. Detalhes completos sobre os cálculos de espalhamento do Continuous podem ser vistos em Barcellos (2016, página 23).

Caso o evento selecionado seja o de fissão, então o programa gera mais dois valores randômicos. O primeiro deles determina o número de nascimentos, seguindo uma formação média de 2,42 nêutrons por fissão. O segundo valor determina as energias conforme a distribuição de nêutrons prontos. É importante notar que não é feito acompanhamento sobre os produtos de fissão, nem meia vida, nem leis de conservação de número bariônico, conservação de energia ou outras características. Além disso, a simulação não considera a formação de nêutrons atrasados. Contudo, a estrutura modular do Continuous permite que novos eventos com outras PDF sejam inseridos.

O gerador aleatório utilizado na versão aperfeiçoada do Continuous feita por Barcellos, 2016, é fundamentado num algoritmo de Matsumoto, 1998. Aquele autor informa que seu gerador aleatório possui um período de  $2^{19937}$ , estando muitas ordens de grandeza acima da função *rand* presente no código C e cujos limites de casas decimais poderiam causar um viés estatístico na simulação.

### 5.3 Metodologia para Determinar Probabilidade de Escape

Para determinar a probabilidade de escape, o domínio foi subdividido em 100 camadas concêntricas de 1cm de espessura. Optou-se por realizar uma medida intrínseca da probabilidade de escape (PEI), ou seja, observando o reator operando em seu estado natural. A amostragem parte da posição de nascimento de todo nêutron oriundo da fissão. Como foi exemplificado no capítulo 4, tal estatística responderia a seguinte pergunta: *“dado que o nêutron surgiu da fissão na região  $dV$  e dentro da faixa de energia  $dE$ , durante a operação natural do reator, então qual a probabilidade dele se encontrar, em qualquer momento futuro, fora do contorno?”*

Assim, as cem subdivisões do domínio foram numeradas de 0 a 99, onde a camada 0 corresponde ao secção de 2cmx2cm no centro do reator, enquanto a camada 99 é o anel quadrado com 200cm x 200cm de lado. Tendo em vista que a Região-2 de moderador não possui U-235, então não serão atribuídos quais quer valores de PEN para as camadas. Abaixo a figura (5.4) representa uma imagem de  $\frac{1}{4}$  do reator, mostrando as divisões em camadas.

Os nêutrons nascidos na mesma camada compartilham quase a mesma distância mínima até a borda mais próxima. Contudo, aqueles nascidos próximos dos cantos da camada devem possuir probabilidade de escapes maiores que os nascidos longe. Entretanto, este efeito não poderá ser mensurado nesta estatística, devido ao fato da contagem verificar apenas camada de origem de nascimento do nêutron. Porém, a vantagem esta na sua fácil implementação e facilidade nos cálculos e pós-processamento.

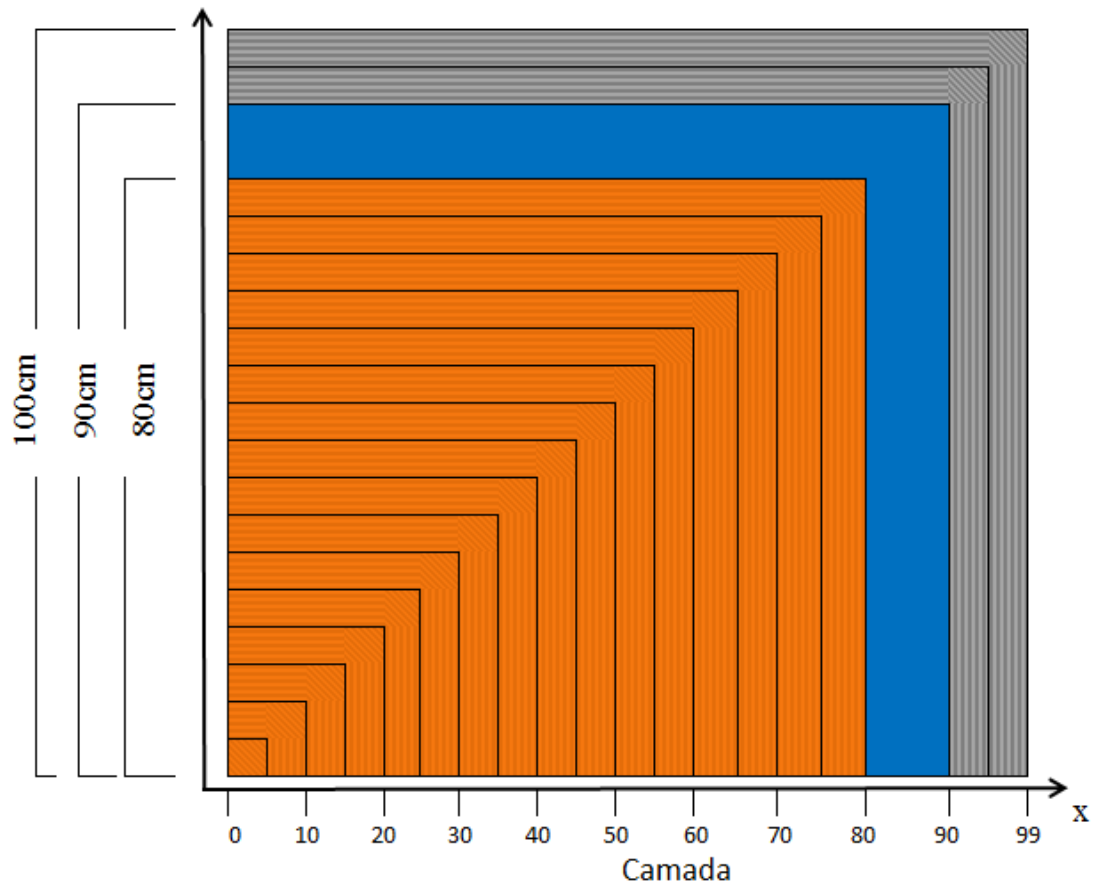


Figura 5.4 – Seção transversal de  $\frac{1}{4}$  do reator, apresentando as cem camadas as quais serão atribuídos valores de probabilidade de escape.

O programa foi ajustado para salvar as energias de nascimento dos nêutrons de cada camada. Caso o nêutron simulado atingisse a condição final de escape, então eram salvos também a energia com que ele saiu do reator, ângulos finais, as posições finais e distâncias percorridas no último passo dentro do reator.

Desejava-se realizar a estatística do reator em seu estado de operação natural qualitativamente subcrítico. Contudo, a condição inicial “impunha” a presença de nêutrons prontos distribuídos uniformemente na Região-1. Esta imposição poderia afetar a estatística de escape, pois o fluxo de nêutrons nos primeiros passos sofreria, durante o período inicial, as conseqüências da distribuição uniforme artificial. Por esta razão, a primeira simulação serviu apenas para verificar o comportamento da população total de nêutrons. Percebeu-se que a população total crescia nos primeiros vinte passos e então caía continuamente. No caso da população de nêutrons térmicos, com energias menores que 1ev, a população inicial era zero e crescia até perto do passo 100, decrescendo a partir de então. Assim, foi estabelecido que a



estatística se iniciaria a partir do centésimo passo para evitar a contagem de escapes influenciada pela condição inicial.

## 6 RESULTADOS

Os resultados foram gerados para uma população inicial de  $5 \times 10^5$  de nêutrons prontos que, após dezenas de gerações, deram origem a  $39 \times 10^6$  nêutrons. Destes nêutrons gerados, apenas 48781 escaparam, resultando numa proporção de 0,124% do total. A partir destes escapes, foram feitas as estatísticas a seguir.

O primeiro resultado analisado foi o tamanho da população ao longo dos passos Monte Carlo e a perturbação causada pelas condições iniciais do problema. Inicialmente, foi necessário avaliar se os parâmetros escolhidos, como dimensões do reator e enriquecimento, correspondiam a um caso com população estável ou, ao menos, levemente decrescente ao longo de 5000 passos Monte Carlo. Desejava-se simular um regime permanente ou quase-permanente operando em “estado natural” – ou seja, sem imposições no fluxo. Logo, a análise do reator exigia certa distância temporal das condições iniciais que foram escolhidas de forma arbitrária. Desta forma, esperava-se que o reator atingisse um regime de operação estável após algum número de passos Monte Carlo. Este número de passos necessários até a estabilidade era desconhecido e só poderia ser determinado através do comportamento da população ao longo do tempo.

A Figura (6.1) mostra a população total inicial de  $5 \times 10^5$  nêutrons. Eles foram impostos uniformemente no núcleo do reator como condição inicial. A curva em preto corresponde a quantidade total de nêutrons no reator do passo 1 até o passo 500 em escala logarítmica em x. A curva em azul representa apenas a parcela de nêutrons térmicos com menos de 1ev de energia. Os nêutrons térmicos praticamente não estão presentes nas condições iniciais. No entanto, a medida que a simulação se desenvolve, sua população cresce até um máximo no passo 100. Em seguida, a população térmica se estabiliza e passa a cair lentamente.

Qualitativamente, intui-se que o sistema seja subcrítico, ainda que seu  $k_{\text{eff}}$  não tenha sido calculado. No entanto, a estabilidade da população de nêutrons térmicos a partir do passo 100 serviu como parâmetro para estabelecer aquele como o momento inicial das análises estatísticas. Desta forma, todo escape ocorrido antes do passo 100 foi descartado, bem como qualquer outro evento ocorrido antes dele, tendo em vista o forte viés das condições iniciais.

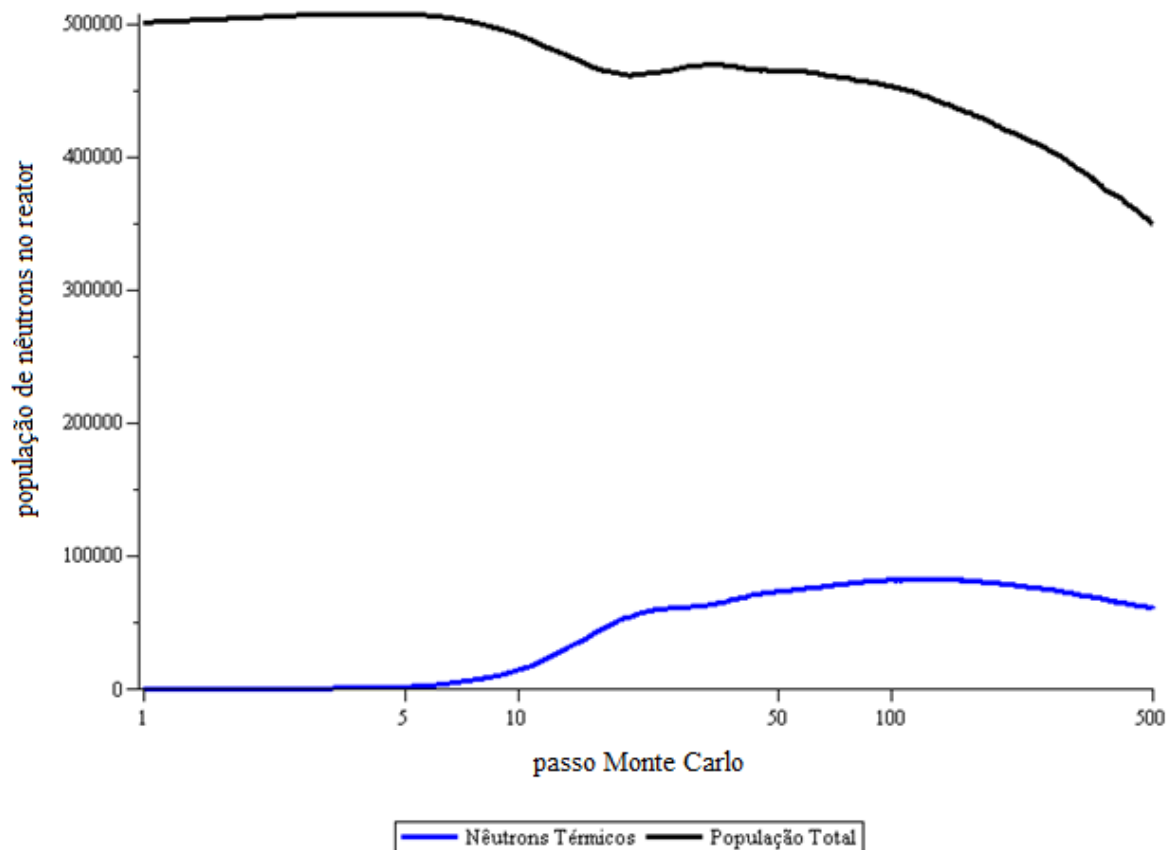


Figura 6.1 – Variação na população de nêutrons entre os passos 1 e 500.

O próximo resultado analisado foi a quantidade de fissões por  $\text{cm}^3$  de cada camada, tendo como intuito a validação os dados gerados. Os valores foram dispostos no histograma da figura (6.2). O eixo  $x$  representa a camada do reator, onde a camada 0 corresponde ao centro do reator, enquanto a camada 80 à interface do núcleo com o moderador, conforme a disposição já apresentada na figura (5.3). O eixo  $y$  indica a densidade de nêutrons nascidos em cada camada.

Sabendo que a densidade de nêutrons gerados esta correlacionada com a potência, esperava-se um gráfico com um máximo na camada 0 – centro do núcleo. Como o problema é simétrico, a curva de densidade de nêutrons também deveria ter derivada nula nessa mesma região. De fato, os dados da simulação cumpriram com esta expectativa. Além disso, observou-se, que na camada 79, onde fica a interface do núcleo com o moderador, ocorreu um incremento no número de fissões em comparação com sua vizinhança próxima. Este fato se justifica pela maior intensidade de corrente de nêutrons térmicos oriundos do moderador, efetuando fissões nestas camadas externas.

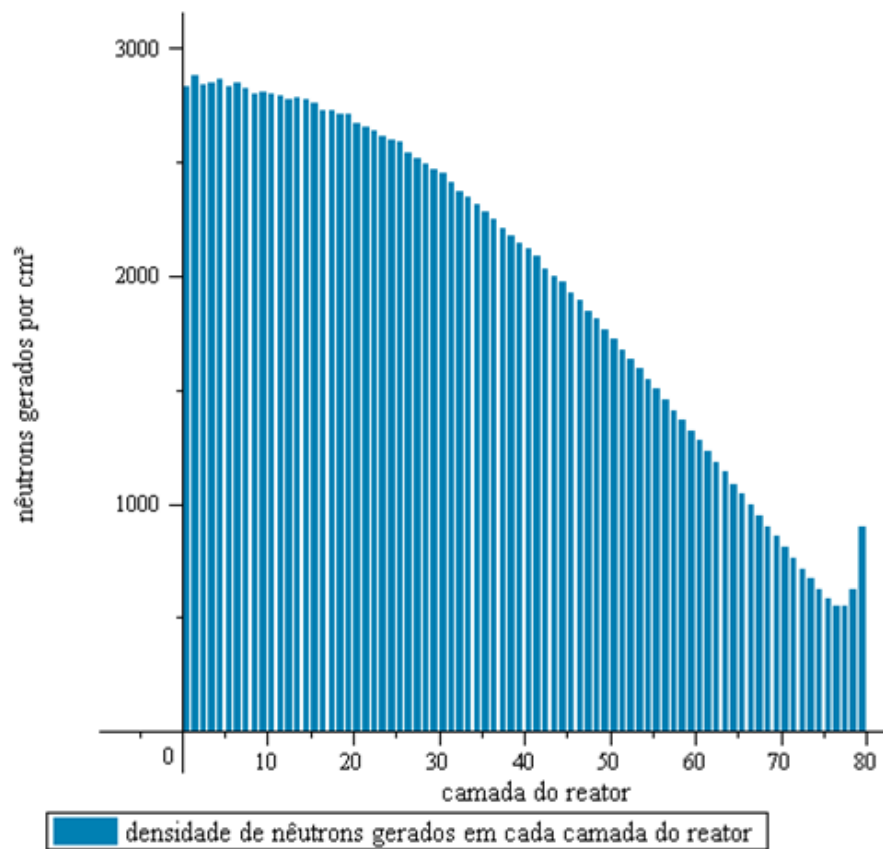


Figura 6.2 – Número de nêutrons gerados por  $\text{cm}^3$  em cada camada do núcleo do reator.

A quantidade de fissões afeta diretamente a amostragem utilizada para calcular a probabilidade de escape. Assim, camadas com poucas fissões têm a tendência de sofrer mais flutuações nas médias estatísticas. Portanto, dado que as camadas são anéis retangulares concêntricos, a área das camadas internas é consideravelmente menor que a das externas. Logo, estas últimas podem ter um maior número absoluto de fissões, ainda que aquelas tenham uma maior densidade de fissões. Desta forma, o valor absoluto de nêutrons gerados formou uma curva de distribuição representada na figura (6.3) abaixo:

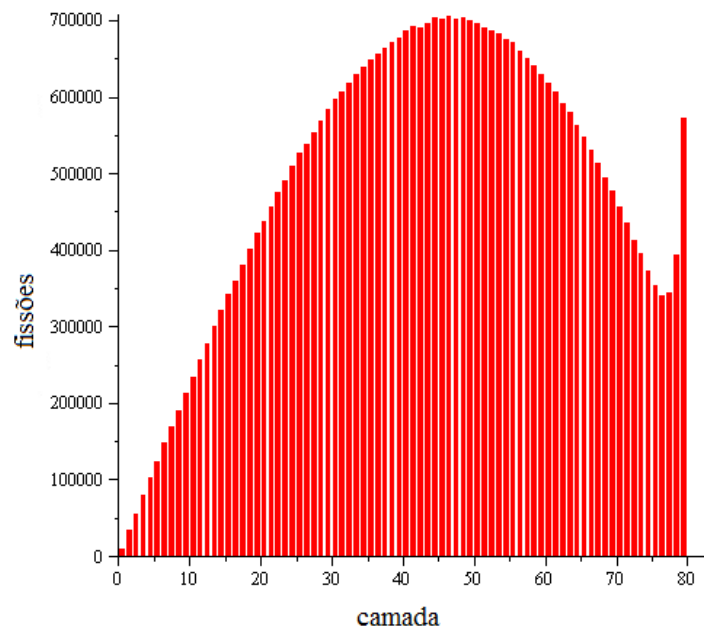


Figura 6.3 – Número de fissões totais em cada camada do núcleo do reator.

A próxima etapa consistiu em contar qual proporção dos nêutrons escapou a partir da camada de nascimento do mesmo. O programa contava quantos nêutrons nasceram uma determinada camada e quantos destes terminaram fora do reator. Então foi feita a razão entre estes valores para estimar a probabilidade de escape local.

Esperava-se que nêutrons nascidos em camadas internas tivessem menor chance de fuga. Coerentemente, os dados de probabilidade de escape revelaram que quanto mais externa a camada, tanto mais provável é a chance de escape, seguindo uma tendência exponencial. Esta tendência é observada claramente no gráfico (6.4), cuja escala é logarítmica e mostra a probabilidade de escape entre as camadas 30 e 79 (núcleo do reator).

A partir da camada 50, a proporção de nêutrons que escaparam vai de 0,022% de chance de fuga na camada 50 até 1,37% de fuga camada 79. Contudo, as regiões mais internas do núcleo não apresentaram uma linha de tendência tão nítida. No entanto, entre as camadas 50 e 80, a proporção de fugas segue um fator exponencial claro, possivelmente devido a lei de Lambert-Beer aplicado ao caso de escape. A mesma tendência foi observada para os nêutrons oriundos da fissão na blindagem do reator, entre as camadas 90 e 99 representados na figura (6.5). No entanto, esta região ainda parece estar sujeita a flutuações devido ao baixo número de amostras que está na ordem de  $10^3$  por camada.

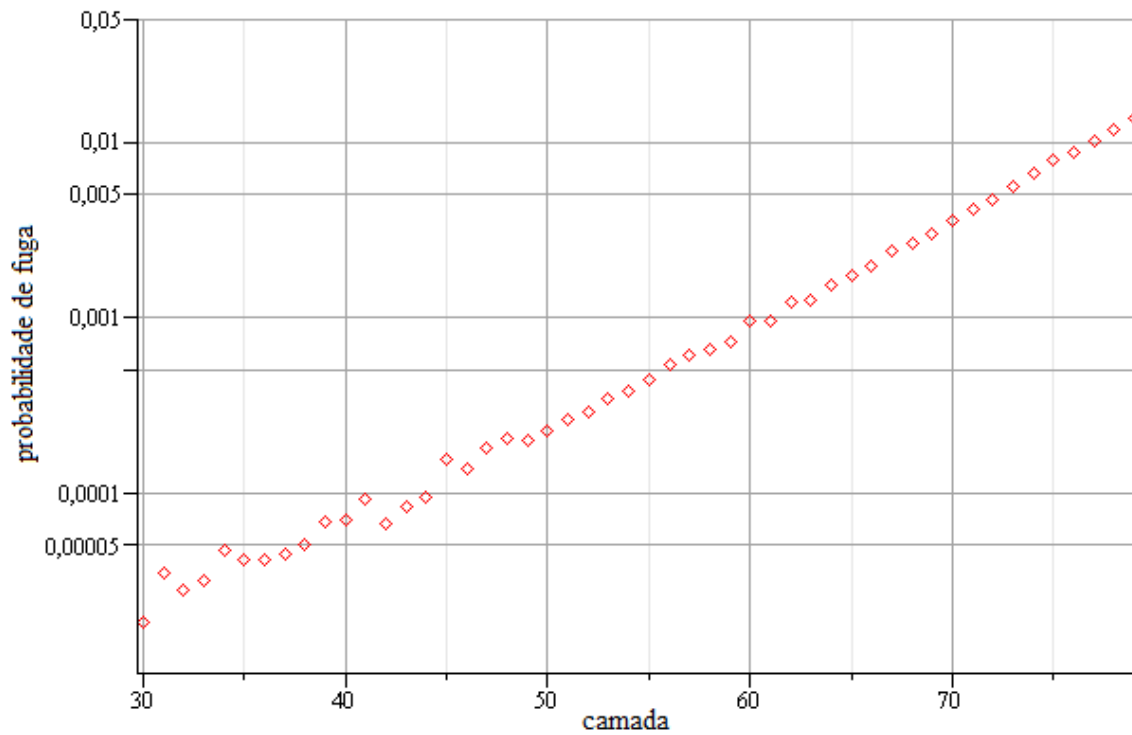


Figura 6.4 – Valores de probabilidade de escape da camada 0 até a camada 79 em escala logarítmica.

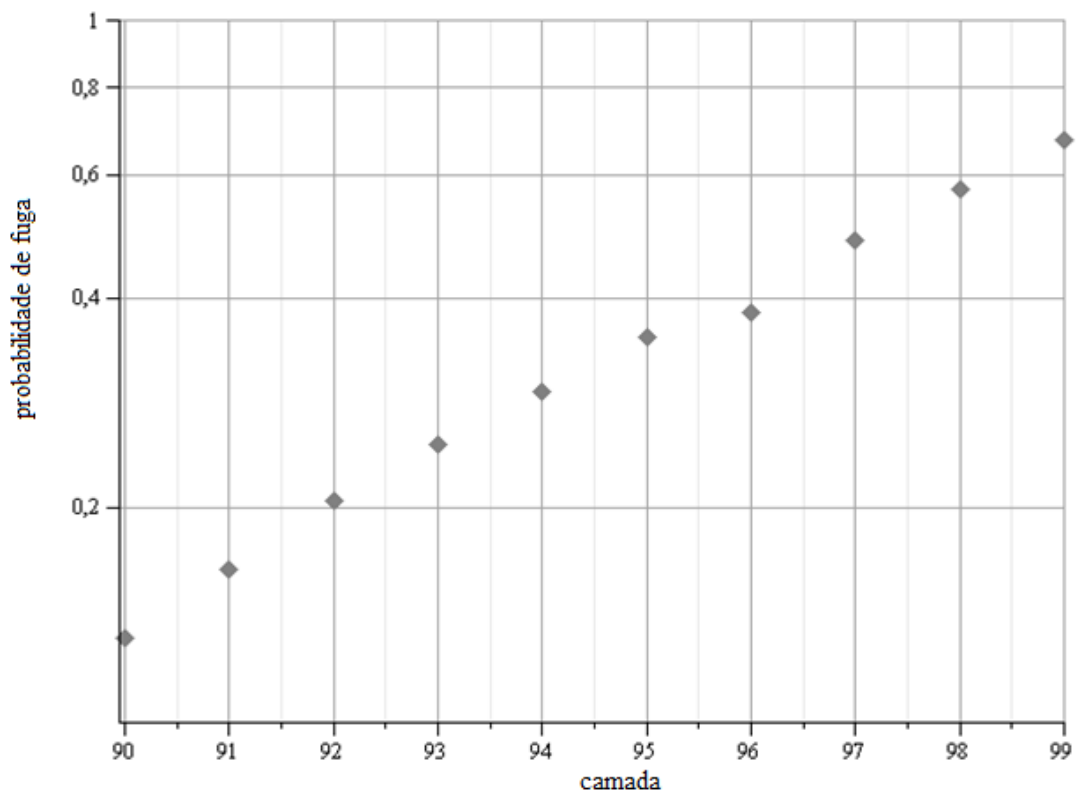


Figura 6.5 – Valores de probabilidade de escape da camada 90 até a 99 em escala logarítmica.

Posteriormente, foram analisados os ângulos de saída de zênite  $\theta$  e azimute  $\varphi$  de todos os 48781 escapes registrados. Para tanto, foi feita a contagem de quantos nêutrons escaparam em cada faixa de  $10^\circ$  de ângulo de saída. Já se previa que o gráfico (6.6) de ângulos de saída fosse simétrico, sendo tal expectativa verificada com ligeiras flutuações. Além disto, a contagem indicou que existe uma componente de incidência ao vetor normal a superfície ligeiramente mais sobressalente no zênite  $\theta$  que no azimute  $\varphi$ . Ou seja, a média dos ângulos do vetor no momento da fuga costumava ser mais próximo a  $90^\circ$  quando comparado ao eixo z que em relação aos eixos x e y. Isso, possivelmente, se deve ao fato que o reator é um bloco de altura infinita, onde as condições de contorno em z são diferentes das de x e y. Assim, nêutrons próximos às arestas possuem maior chance de fuga por x e y mesmo em diferentes combinações de ângulos abertos nessas direções.

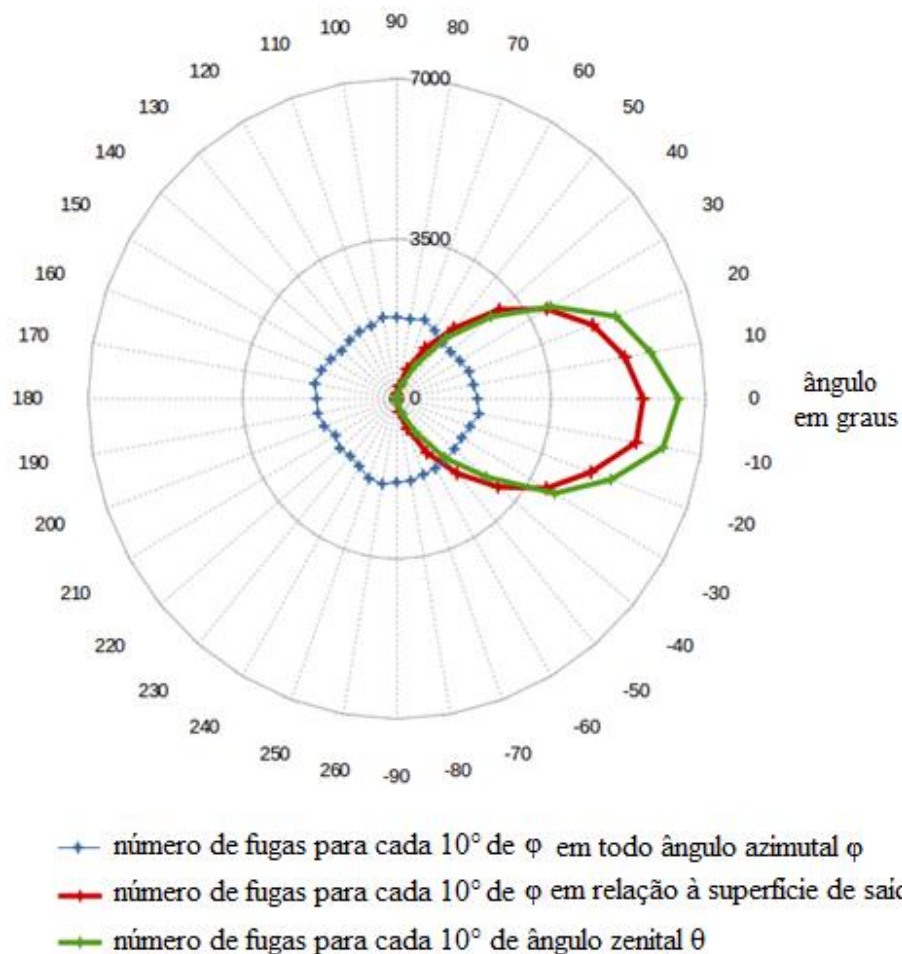


Figura 6.6 – Números de fugas em cada ângulos de saída.

Outro objetivo cumprido foi efetuar o cálculo da probabilidade de escape conforme a energia de nascimento dos nêutrons. Para tanto, o espectro foi dividido em grupos de 100keV ou 0,1MeV. Depois, o núcleo do reator foi separado em três setores chamados “A”, “B” e “C”. O setor “A” contemplava as camadas menores que 65cm e dele fugiram 8640 nêutrons. Já o setor “B” contém as camadas entre 66cm até 75cm dele escaparam 17881 nêutrons. Por último, o setor “C” compunha as camadas 76 até 79 e dele fugiram 19051 nêutrons. Além destes três setores, a blindagem toda foi considerada como um setor separado D o qual não se realizou estatísticas na energia. Isto foi devido ao baixo número de 3209 fugas e, ao separar estas fugas em grupos de 0,1MeV, formavam-se espaços amostrais muito sensíveis a flutuações e de pouca relevância estatística. Mesmo assim, o espectro de fuga da região D foi construído e será comparado com os demais, apenas a probabilidade de escape dependente da energia é que não foi calculada para D.

Portanto, o reator ficou dividido da seguinte forma:

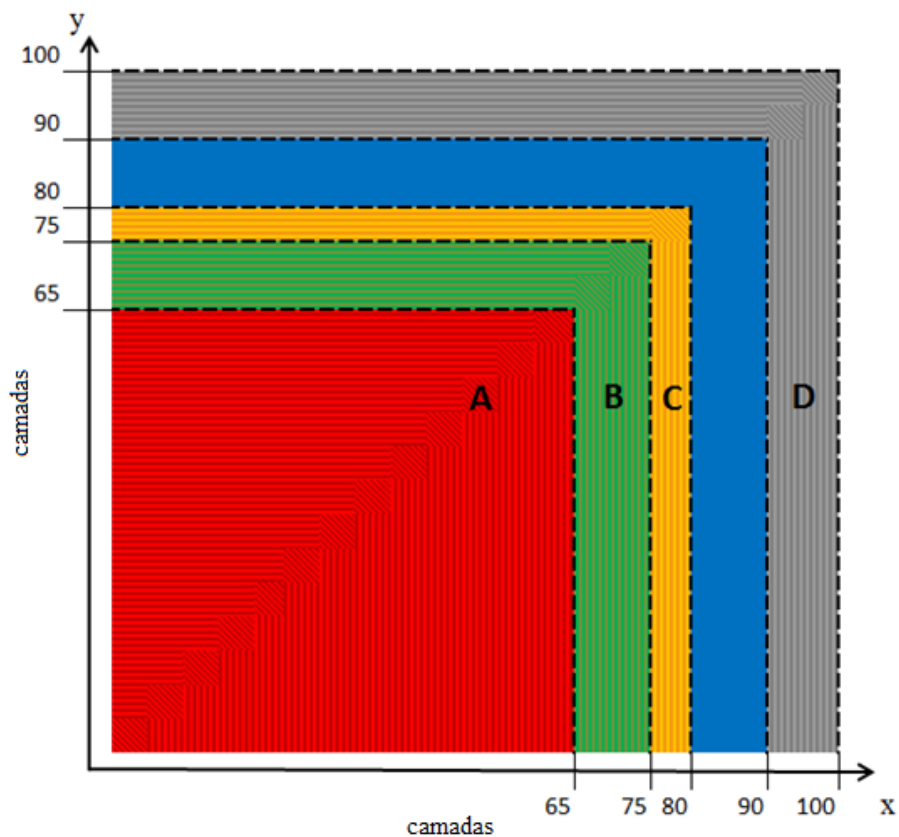


Figura 6.7 – Visão de  $\frac{1}{4}$  do núcleo apresentando os setores.



O gráfico (6.8) apresenta o espectro de energia de nascimento dos nêutrons que escaparam do setor A comparado com a probabilidade de escape de cada faixa de energia. Assim, a linha vermelha trata do espectro de nascimento dos nêutrons que escaparam do setor A. Já os histogramas azuis mostram a probabilidade de escape daquela faixa de energia. Desta forma, enquanto a linha vermelha mostra qual a fração dos que fugiram que nasceu com aquela energia. Já o histograma azul mostra qual fração dos nêutrons que nasceram com aquela energia que conseguiu escapar.

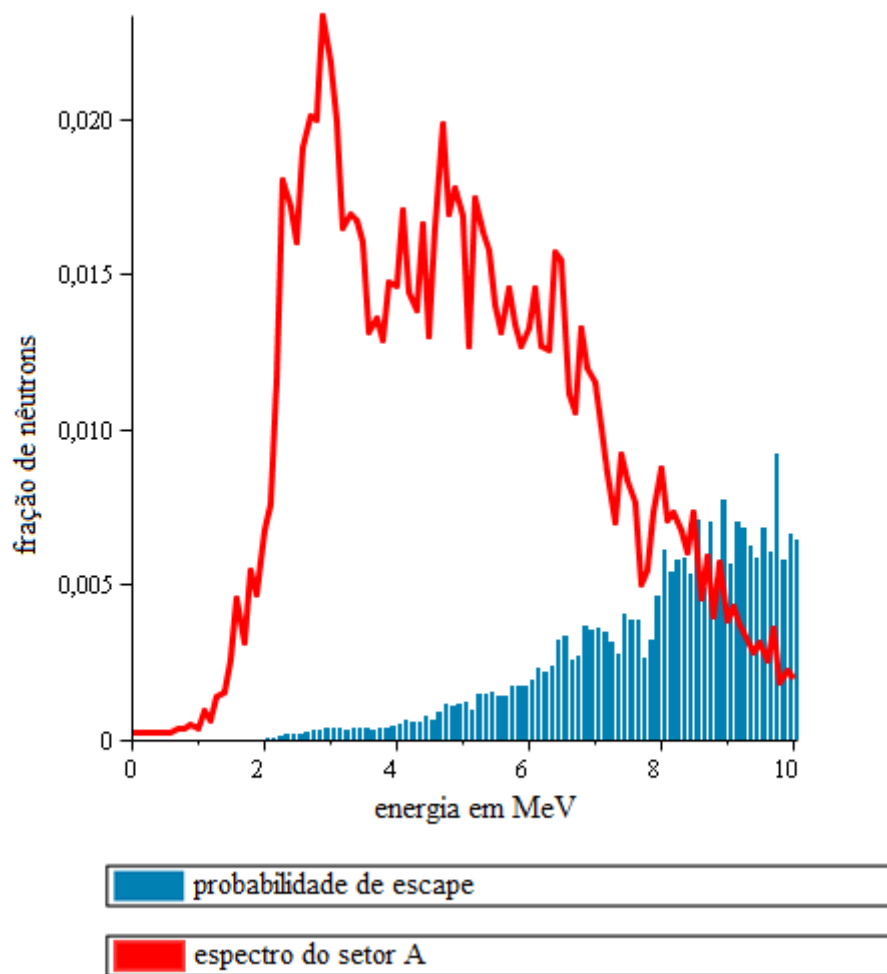


Figura 6.8 – Gráficos sobrepostos do espectro de escape do setor A e sua probabilidade de escape conforme a energia.

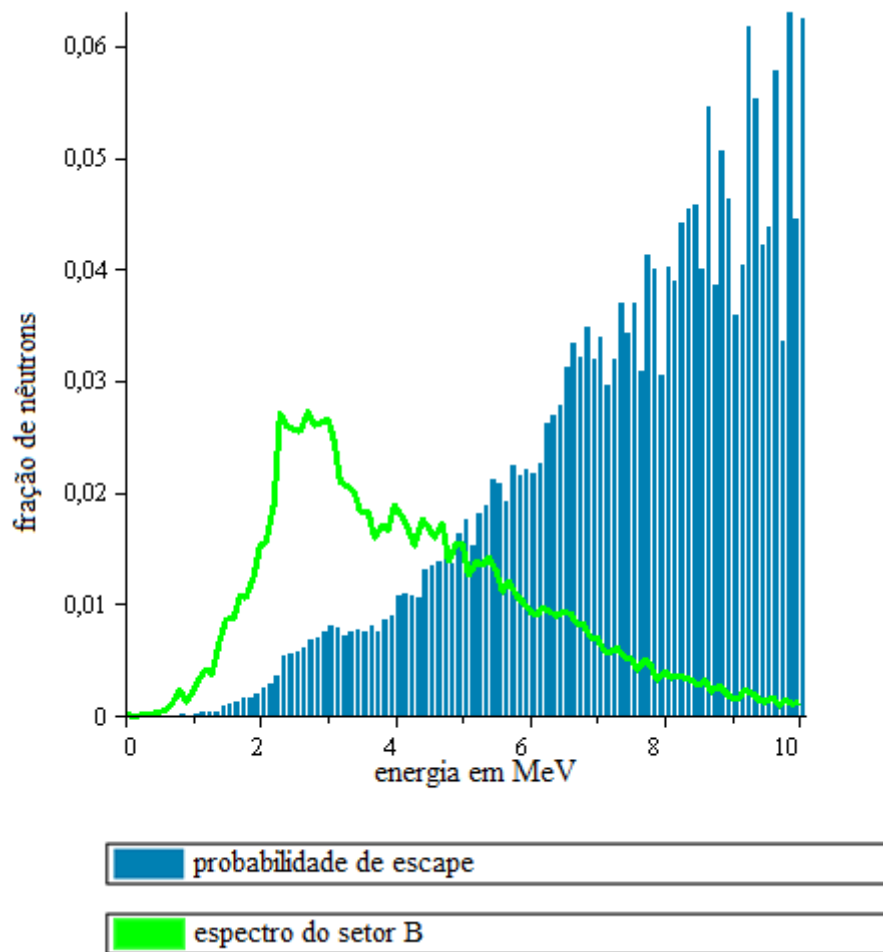


Figura 6.9 – Gráficos sobrepostos do espectro de escape do setor B e sua probabilidade de escape conforme a energia.

O mesmo raciocínio foi usado para plotar o gráfico da figura (6.9). Este representa o espectro de energia de nascimento dos nêutrons que escaparam do setor B, juntamente com a probabilidade de escape de cada faixa de energia. Assim, a linha verde mostra o espectro de nascimento dos nêutrons que escaparam do setor B e os histogramas azuis mostram a probabilidade de escape de cada faixa de energia. Nota-se que o setor B corresponde a uma região mais externa que o setor A e, por isso, a fração de nêutrons que conseguiu escapar é maior. Esta característica se torna ainda mais evidente para caso do setor C na próxima figura (6.10).

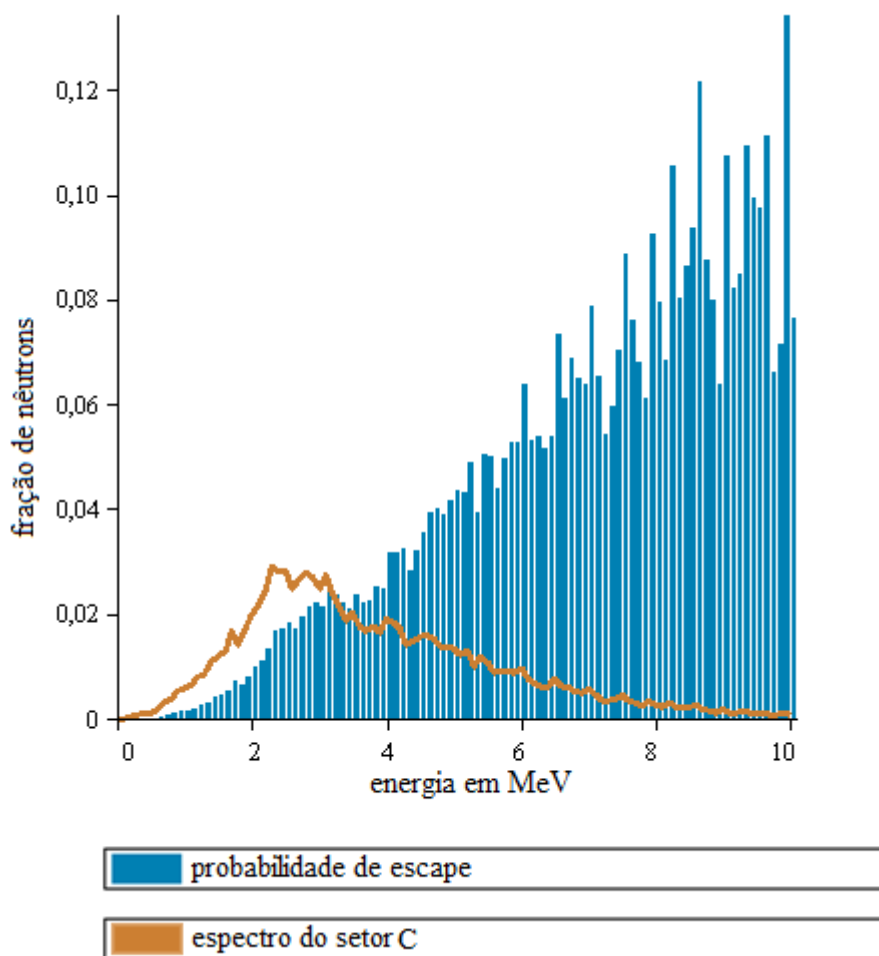


Figura 6.10 – Gráficos sobrepostos do espectro de escape do setor C e sua probabilidade de escape conforme a energia.

Em seguida, foi feito um gráfico comparativo do espectro de nascimento dos nêutrons que escaparam. Para cada nêutron que escapou, foi computada a sua energia inicial no momento da fissão e contabilizado num gráfico de frequência. Estes gráfico de frequência se trata das mesmas curvas de espectro dispostos em vermelho, verde e marrom das figuras (6.8), (6.9) e (6.10) respectivamente. Contudo, na figura (6.11) estas curvas de espectro foram normalizadas com a mesma área e inseridas sobrepostas para fim de comparação.

Foi observado que os espectros oriundos dos setores A, B e C possuem alguns picos e vales coincidentes. Por exemplo, as três regiões possuem um vale próximo da faixa dos 3,8MeV, possivelmente devido ao efeito combinado das sessões de choque dos materiais do reator. Contudo, é nítido que nêutrons de alta energia contribuem muito mais para os escapes do setor A quando comparados com os setores B e C. Isto se deve ao fato que o setor A é o

mais interno e dificilmente nêutrons com menos de 2 Mev são capazes de realizar espalhamentos sucessivos até sair desta região.

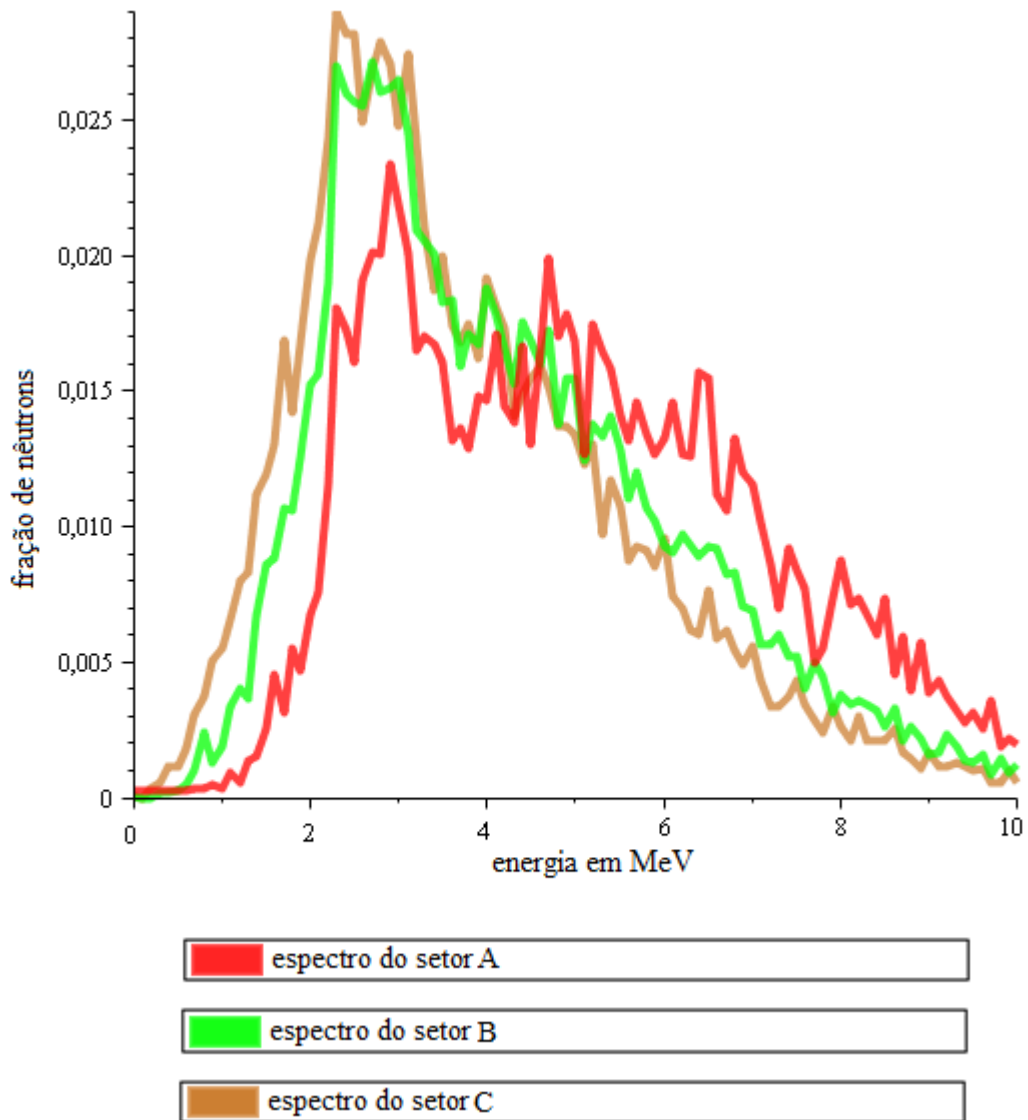


Figura 6.11 – Gráficos sobrepostos dos espectros de nascimentos dos nêutrons que escaparam dos três setores.

Com objetivo de comparar o espectro dos setores A, B, C e D, foi feito um gráfico da figura (6.12) seguindo a mesma metodologia usada no gráfico (6.11). No entanto, a figura (6.12) inclui as fissões ocorridas no setor D correspondente a blindagem. As curvas do espectro foram dispostas em perspectiva par facilitar a visualização.

A figura (6.12) mostra que o setor D possui um espectro não muito distinto do próprio espectro de fissão do U-235. Isso se deve ao fato de que os poucos centímetros de blindagem e a ausência de moderador faz com que aumente a chance de escape, até mesmo para nêutrons de baixa energia. No limite, é esperado que as superfícies mais externas do reator possuam espectros de escape não muito distintos do próprio espectro de fissão.

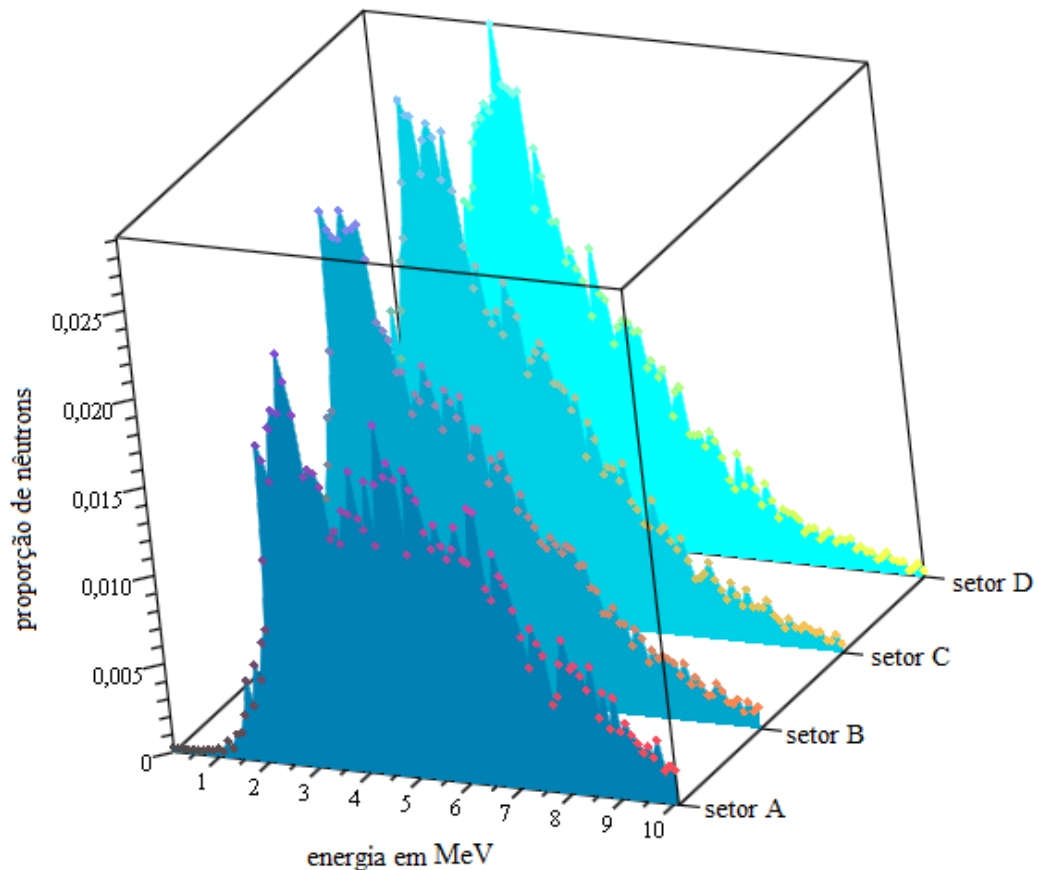


Figura 6.12 – Gráfico normalizado do espectro dos nêutrons dos quatro setores.

A figura seguinte (6.13) compara a probabilidade de escape em função da energia para os três setores. A PEN foi determinada pela razão entre nêutrons que escaparam sobre os nêutrons totais que surgiram por fissão naquela faixa de energia, naquele setor. Desta forma, pode-se observar na figura (6.13) que a probabilidade de escape para nêutrons do setor A é menor que 1% em qualquer energia. Já os nêutrons oriundos do setor C possuem uma probabilidade de escape maior que 10% para qualquer energia acima de 7,5 MeV. Alguns picos

registraram uma probabilidade de escape próxima a 18%, ou seja, quase um sexto dos nêutrons naquela faixa do espectro termina fora do reator após sucessivos espalhamentos.

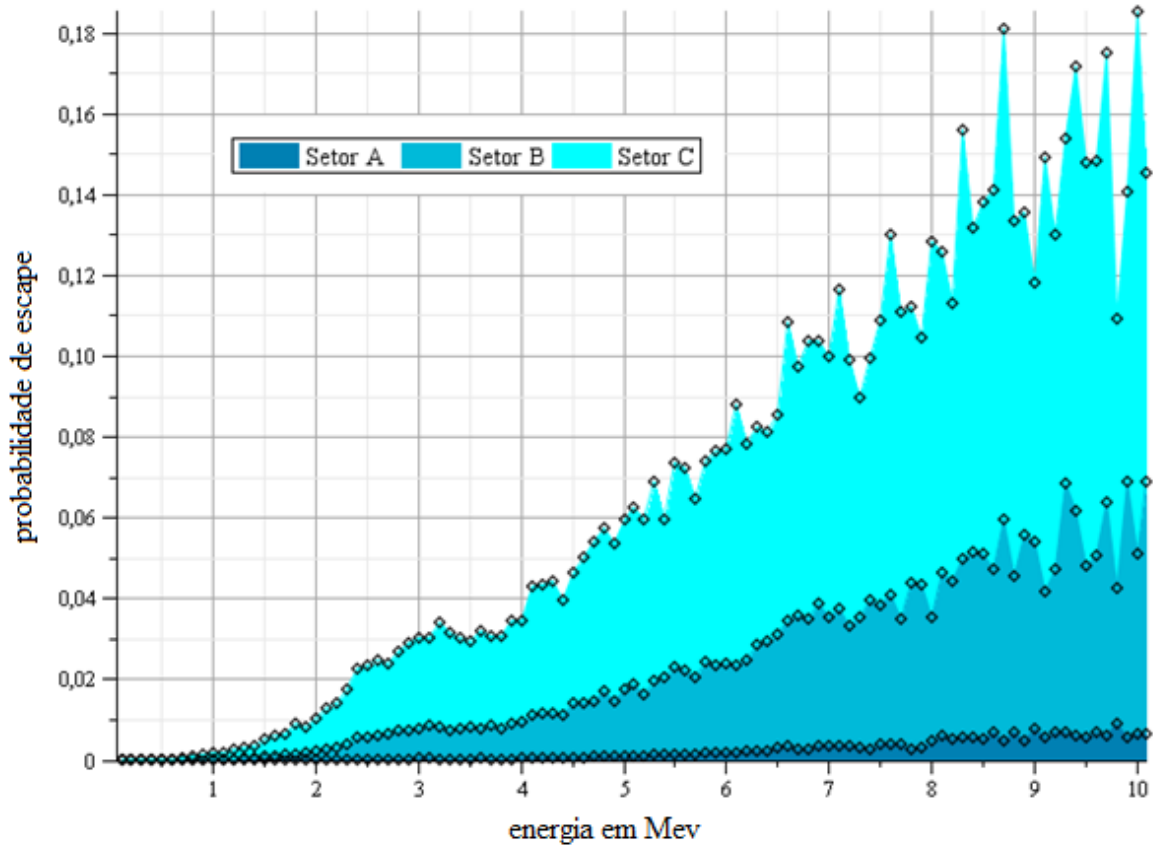


Figura 6.13 – Probabilidade de escape conforme a energia para os setores A, B e C.

O ultimo conjunto de gráficos (6.14) e (6.15) consiste num mapa onde cada nêutron que escapou é representando por um ponto. A coordenada x do ponto indica a energia que o nêutron possuía ao nascer, enquanto a coordenada y mostra a energia ao escapar. As cores destacam apenas as faixas de energia.

Assim, a figura (6.14) apresenta todas as 48781 fugas registradas na faixa entre 0 e 10 Mev. Com olhar atento, é possível notar linhas horizontais com espaços vazios contínuos. Elas são mais nítidas para as faixas de 0,43 Mev, e 0,99 Mev e 1,37 Mev. A figura (6.15) mostra em detalhes as fugas dos nêutrons com menos de 4Mev, onde as linhas podem ser observadas com mais nitidez.

A formação destas linhas se assemelha as linhas espectrais da absorção da luz. Se a analogia for válida, é possível que estas linhas sejam resultantes de uma combinação de

sessões de choque dos materiais do reator. Desta forma, estas linhas representam valores improváveis de um nêutron possuir na fuga, devido a propriedades dos materiais do reator, agindo como uma “impressão digital” da sessão de choque combinada destes.

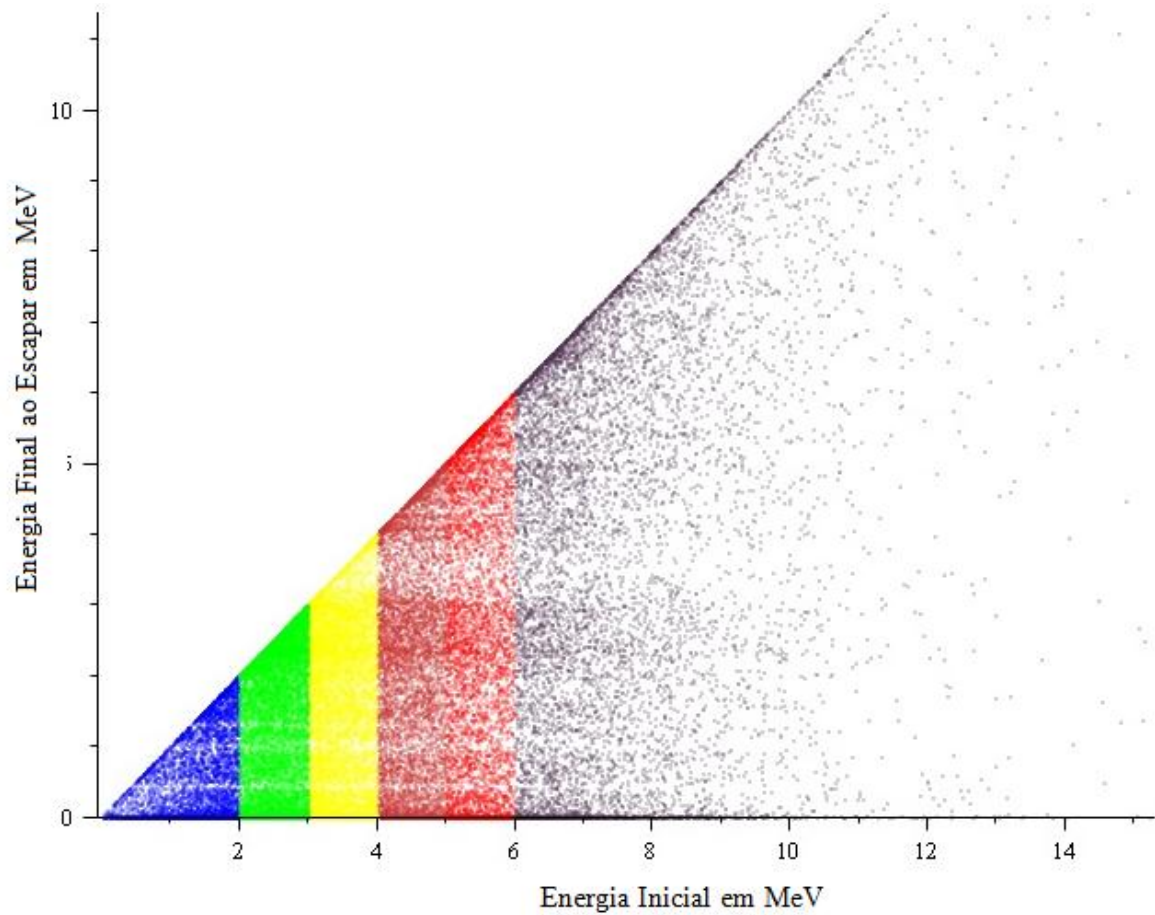


Figura 6.14 – Mapa de energia inicial e final dos nêutrons que escaparam

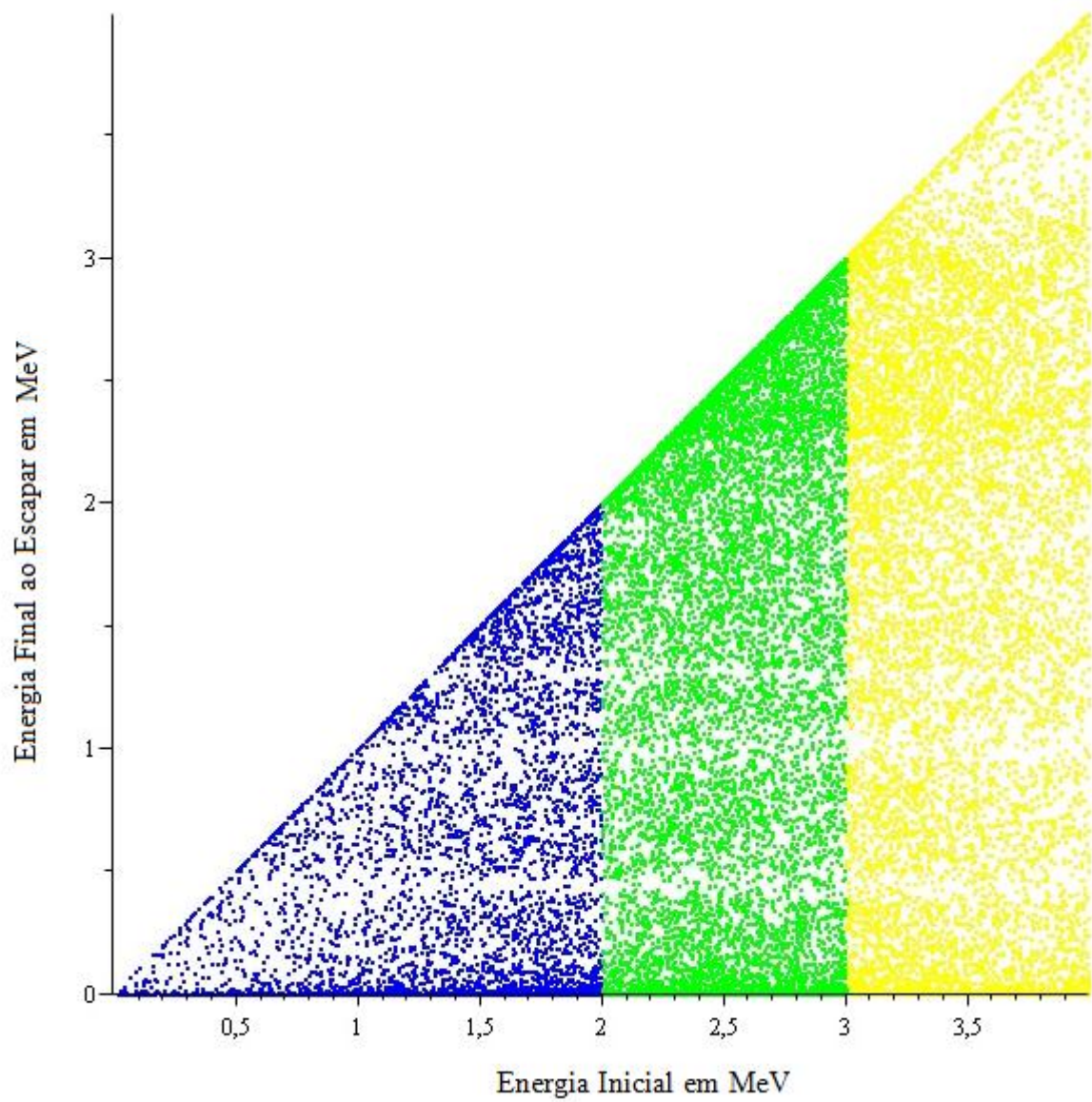


Figura 6.15 – Mapa de energia inicial e final dos nêutrons que escaparam com detalhe para as energias menores que 4 MeV.



## 7 CONCLUSÃO

Esta dissertação se voltou para o desenvolvimento de uma metodologia capaz de gerar um campo de probabilidades de escape de nêutrons conforme a posição e energia iniciais. Para sua implementação, foi feito um caso de estudo simulado por método de Monte Carlo, utilizando parâmetros contínuos no espaço e na energia.

Para isto, foi utilizado como base o programa Continuous, cujo código c++ simula o transporte de nêutrons utilizando Monte Carlo com propriedades físicas parametrizadas de forma contínua. Foram realizadas adaptações no código para efetuar as contagens de fuga e as operações estatísticas relacionadas a elas. O programa rodou de forma estável e foi capaz de gerar  $4 \times 10^6$  histórias de nêutrons, partindo de uma população inicial de  $5 \times 10^5$ . O tempo de processamento não foi maior que 12 horas num computador residencial.

Verificou-se que posição e a energia inicial do nêutron afeta sensivelmente as probabilidades de fuga. Ainda que o problema fosse qualitativo e constituído apenas com os elementos U-235, U-238, O-16 e H-1, a metodologia foi capaz de apresentar diferentes propriedades ligadas a fuga de nêutrons. Uma delas foram as curvas de espectro de energia inicial e final dos nêutrons que escaparam, além de histogramas indicando qual a proporção de nêutrons que se espalharam para fora do domínio conforme a energia e posição. Estes resultados seriam um caminho para, futuramente, gerar parâmetros capazes de aperfeiçoar métodos numéricos que demandam estimativas em suas condições de contorno, por exemplo.

Portanto, a metodologia foi capaz de apresentar diferentes correlações entre a energia inicial e a chance que um nêutron possui de escapar naquele ponto do reator. Seria possível parametrizar funções geradas, desenvolvendo uma ampla gama de métodos para corrigir aproximações.

O método utilizado apresentou a vantagem de estudar o sistema em seu estado natural de operação. Logo, todas as características colhidas representariam informações intrínsecas do reator. Contudo, a escolha do método também demandou algumas atenções. Primeiro, porque ele é voltado apenas para regiões com enriquecimento. Segundo, porque algumas áreas, mesmo possuindo material físsil, contêm baixo fluxo e baixo número de fissões. Estes locais se tornam fontes de incertezas e flutuações estatísticas que precisam cuidado em seu tratamento. Por fim, a baixa probabilidade de fuga requer que uma elevada quantidade dados

seja gerada para realizar uma amostragem significativa. Por conseguinte, isto também pode ser um limitador durante o pós-processamento.

Ainda que se tratasse de um caso qualitativo, com regiões homogêneas e materiais limitados, foram observados diversos comportamentos coerentes com os de operação de reatores reais. Alguns de seus resultados foram surpreendentes e demandariam um suporte experimental para sua validação completa.

Um deles é o crescimento exponencial do escape conforme a distância da superfície, análogo a lei de Lambert-Beer da luz. Trabalhos futuros também podem verificar se esta propriedade se mantém com diferentes blindagens, geometrias e moderadores. De fato, esta tendência exponencial é mais um indicativo que a probabilidade de escape pode ser estimada e utilizada como uma “pseudo” sessão de choque para ajustar parâmetros de modelos numéricos que lidam com aproximações em suas condições de contorno.

Outro resultado foram as linhas espectrais de absorção apresentadas pelos nêutrons durante a fuga, tal qual uma "impressão digital" do reator. É possível que o efeito seja consequência das várias aproximações tomadas pelo modelo qualitativo como meio homogêneo, concêntricos, simétricos, entre outros. Ou então, talvez seja resultado do efeito combinado das sessões de choque dos diferentes materiais. De qualquer maneira, isto seria um interessante tema de outros estudos.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agostinelli, S.; Allison, J.; Amako, K. a.; Apostolakis, J.; Araujo, H.; Arce, P.; Asai, M.; Axen, D.; Banerjee, S.; Barrand, G. et al. Geant4-a simulation toolkit, **Nuclear instruments and methods in physics research section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, vol. 506(3), p. 250-303, 2003

Barcellos, L. F. F.; **On a continuous energy Monte Carlo simulator for neutron interactions in reactor core material considering up-scattering effects in the thermal energy region**, PhD thesis, UFRGS, 2016

Brandimarte, P. **Handbook in Monte Carlo Simulation: Applications in Financial Engineering, Risk Management, and Economics**, Wiley, 2014

de Camargo, D. Q. **Um modelo estocástico de simulação neutrônica considerando o espectro e propriedades nucleares com dependência contínua de energia**. PhD thesis, UFRGS, 2011

de Camargo, D. Q.; Bodmann, B. E.; de Vilhena, M. T.; de Queiroz Bogado Leite, S.; Alvim, A. C. M. **A stochastic model for neutrons simulation considering the spectrum and nuclear properties with continuous dependence of energy**, Progress in Nuclear Energy, vol. 69, p. 59 - 63. Research & amp; Developments in Advanced Nuclear Reactors, 2013

Cowan, P.; Dobson, G.; Martin, J. **Release of MCBEND 11. In Proc. 12th International Conference on Radiation Shielding (ICRS-12) and 17th Topical Meeting on Radiation Protection and Shielding (RPSD-2012)**, 2013.

Duderstadt, J.; Martin, W. **Transport Theory. Wiley-Interscience Publications. Books on Demand**, 1979.

Glasstone, S.; Sesonske, A. **Nuclear reactor engineering: Reactor design basics**, Volume One, 1994.

Hartmann, A. K.; Rieger, H, 2001. "**Optimization Algorithms in Physics**", Wiley

Lamarsh, J. **Introduction to nuclear reactor theory. Addison-Wesley series in nuclear engineering**. Addison-Wesley Pub. Co., 1966.

Leppänen, J. **Serpent a continuous-energy Monte Carlo reactor physics burnup calculation code**, VTT Technical Research Centre of Finland, vol. 4, 2013.

Matsumoto, M.; Nishimura, T. **Mersenne Twister: A 623-dimensionally Equidistributed Uniform Pseudo-random Number Generator**, ACM Trans. Model. Comput. Simul., vol. 8(1), p. 3-30, 1998.

Mokhtar-Kharroubi, M; "**Mathematical Topics in Neutron Transport Theory**", Editora World Scientific Publishing, 1997

Osborn, R. K.; "**Foundations of Neutron Transport Theory**", Gordon and Breach, Science Publishers Inc, 1966.

Petrie, L.; Cross, N. **KENO IV: An improved Monte Carlo criticality program.** Technical report, Oak Ridge National Lab., Tenn.(USA), 1975.

Reuss, P. Neutron Physics. **Nuclear engineering.** EDP Sciences, 2008.

Romano, P. K.; Forget, B. **The OpenMC Monte Carlo particle transport code,** Annals of Nuclear Energy, vol. 51, p. 274\_281, 2013.

Santoro, A; Novaes, S. F.; Oguri V., 2001. **Noções de Estatística, Simulação e Erros, Novas Técnicas,** CBPF-001/01, 2001

Sekimoto, H. **Nuclear Reactor Theory,** Tokyo Institute of Technology Press, Tokyo, vol. 11, 2007.

Sjenitzer, **B. L. The Dynamic Monte Carlo Method for Transient Analysis of Nuclear Reactors.** TU Delft, Delft University of Technology, 2013.

Team, X.-. M. C. **MCNP: A general Monte Carlo N-Particle transport code,** 2003.

Thiejsen, J. M.; Gelbard, S., "**Computational Physics**", Cambridge University Press, 1999.

Wolfson, M. M.; Pert, G. J., "**An Introduction to Computer Simulation**", Oxford University Press, 1999