

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

**UM MODELO ESTOCÁSTICO DE SIMULAÇÃO NEUTRÔNICA
CONSIDERANDO O ESPECTRO E PROPRIEDADES NUCLEARES COM
DEPENDÊNCIA CONTÍNUA DE ENERGIA**

por

Dayana Queiroz de Camargo

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, janeiro de 2011

**UM MODELO ESTOCÁSTICO DE SIMULAÇÃO NEUTRÔNICA
CONSIDERANDO O ESPECTRO E PROPRIEDADES NUCLEARES COM
DEPENDÊNCIA CONTÍNUA DE ENERGIA**

por

Dayana Queiroz de Camargo

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Túllio Menna Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Sergio de Queiroz Bogado Leite

Aprovada por:

Prof. Dr. Antonio Carlos Marques Alvim

Pro^a. Dr^a. Cynthia Feijo Segatto

Pro^a. Dr^a. Gabriela Hoff

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros

Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 25 de janeiro de 2011

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor Dr. Bardo E. J. Bodmann pelo conhecimento transmitido e pela forma tranquila e segura de sua orientação.

Agradeço, igualmente, ao professor Dr. Marco T. M. B. de Vilhena pela amizade e pelas contribuições durante este período.

Aos meus pais, Jovino e Anita, que sempre me deram o apoio necessário para que pudesse estudar e ao meu namorado Daniel pelo apoio e assistências prestadas.

À CNEN pelo suporte financeiro e ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes.

RESUMO

UM MODELO ESTOCÁSTICO DE SIMULAÇÃO NEUTRÔNICA CONSIDERANDO O ESPECTRO E PROPRIEDADES NUCLEARES COM DEPENDÊNCIA CONTÍNUA DE ENERGIA

Nesta tese desenvolveu-se um modelo estocástico para simular o transporte de nêutrons em um meio heterogêneo, considerando espectros de nêutrons contínuos e as propriedades nucleares com a sua dependência contínua de energia. Este modelo foi implementado utilizando o método Monte Carlo para a propagação dos nêutrons nos diferentes meios. Devido à limitação com respeito ao número de nêutrons que pode ser simulado em tempo de processamento computacional aceitável introduziu-se o volume de controle variável junto às condições de contornos (pseudo-)periódicas para contornar este problema. A escolha pelo Monte Carlo físico clássico deve-se ao fato de poder decompor em constituintes mais simples o problema de resolver uma equação de transporte. Os constituintes podem ser tratados separadamente, estes são a propagação e a interação, respeitando as leis de conservação de energia e momento, e as relações de probabilidade que determinam a respectiva interação. Está-se consciente do fato que o problema abordado nesta tese é longe de ser comparável com a construção de um reator nuclear, porém nesta discussão o alvo principal era desenvolver o modelo Monte Carlo, implementar o código computacional numa linguagem que permite extensões de forma modular. Este estudo permitiu uma análise detalhada da influência da energia sobre a população de nêutrons e seu impacto sobre o ciclo de vida de nêutrons. Dos resultados obtidos, mesmo para um arranjo geométrico simples, pode-se concluir a necessidade de considerar a dependência de energia, ou seja, um fator de multiplicação efetivo espectral deve ser introduzido para cada grupo de energia separadamente.

ABSTRACT

A STOCHASTIC MODEL FOR NEUTRON SIMULATION CONSIDERING THE SPECTRUM AND NUCLEAR PROPERTIES WITH CONTINUOUS DEPENDENCE OF ENERGY

This thesis has developed a stochastic model to simulate the neutrons transport in a heterogeneous environment, considering continuous neutron spectra and the nuclear properties with its continuous dependence on energy. This model was implemented using Monte Carlo method for the propagation of neutrons in different environment. Due to restrictions with respect to the number of neutrons that can be simulated in reasonable computational processing time introduced the variable control volume along the (pseudo-) periodic boundary conditions in order to overcome this problem. The choice of class physical Monte Carlo is due to the fact that it can decompose into simpler constituents the problem of solves a transport equation. The components may be treated separately, these are the propagation and interaction while respecting the laws of energy conservation and momentum, and the relationships that determine the probability of their interaction. We are aware of the fact that the problem approached in this thesis is far from being comparable to building a nuclear reactor, but this discussion the main target was to develop the Monte Carlo model, implement the code in a computer language that allows extensions of modular way. This study allowed a detailed analysis of the influence of energy on the neutron population and its impact on the life cycle of neutrons. From the results, even for a simple geometrical arrangement, we can conclude the need to consider the energy dependence, is a spectral effective multiplication factor should be introduced each energy group separately.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	FÍSICA DE REATORES	5
2.1	NÊUTRON COMO PARTÍCULA	5
2.2	INTERAÇÃO DO NÊUTRON COM A MATÉRIA	6
2.2.1	SEÇÕES DE CHOQUE	8
2.2.2	INTERAÇÃO DE NÊUTRONS COM A MATÉRIA E SEÇÃO DE CHOQUE MACROSCÓPICA	10
2.3	FISSÃO EM CADEIA	12
2.4	EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN	14
2.4.1	DERIVAÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN	15
3	O MÉTODO DE MONTE CARLO NO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS	20
3.1	MONTE CARLO COMPARADO À OUTRAS ABORDAGENS NUMÉRICAS	20
3.2	SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS POR MEIO DE MONTE CARLO	22
3.3	MÉTODO DE AMOSTRAGEM ALEATÓRIA	27
4	PROGRAMA PARA A SIMULAÇÃO NEUTRÔNICA	29
4.1	DESCRIÇÃO DO PROBLEMA	29
4.2	A TRAJETÓRIA DO NÊUTRON	39
4.3	DESCRIÇÃO DO PROGRAMA “CONTINUOUS”	42
5	ANÁLISE DOS RESULTADOS	47
5.1	DENSIDADE DE NÊUTRONS DEPENDENTES DO TAMANHO DO VO- LUME TOTAL E DE CONTROLE	47

5.2	ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA POSIÇÃO NA DENSIDADE DE NÊUTRONS	51
5.3	O FATOR DE MULTIPLICAÇÃO INSTANTÂNEO ESPECTRAL MONTE CARLO	70
5.4	RESULTADOS OBTIDOS PARA O CASO COM ^{235}U PURO E ÁGUA COMO MODERADOR	73
6	CONCLUSÃO	75
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	78
	APÊNDICES	82
I	ESTUDO COMPARATIVO: PARAMETRIZAÇÕES DAS SEÇÕES DE CHOQUE \times ARQUIVOS DE DADOS NUCLEARES AVALIADOS PARA AS SEÇÕES DE CHOQUE	82
II	CONCEITOS BÁSICOS	85
II.1	CLASSIFICAÇÃO DAS REAÇÕES DE ACORDO COM AS ENERGIAS DOS NÊUTRONS	85
II.2	SEÇÃO DE CHOQUE MICROSCÓPICA (σ)	85
II.3	SEÇÃO DE CHOQUE MACROSCÓPICA (Σ)	86
II.4	MODERAÇÃO E TERMALIZAÇÃO DE NÊUTRONS	86
II.5	VARIÂNCIA σ^2	88

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Romanos

A :	área.	$[cm^2]$
E :	energia dos nêutrons.	$[eV, Mev]$
h :	constante de Planck.	$[eV.s]$
I :	corrente de nêutrons.	
k_{eff} :	fator de multiplicação efetivo.	
k_{∞} :	fator de multiplicação para um meio infinito.	
\hat{n} :	vetor unitário.	
N :	densidade de atômica.	$[N^{\circ} \text{ de átomos}/cm^3]$
n :	número de amostras aleatórias.	
p :	momento da partícula.	$[eV.s/cm]$
p_a :	probabilidades de absorção.	
p_f :	probabilidades de fissão.	
p_s :	probabilidades de espalhamento.	
\mathbf{r} :	vetor posição.	
V :	volume.	$[cm^3]$
X :	espessura.	$[cm]$
x, y e z :	coordenadas do vetor posição \mathbf{r} .	

2. Caracteres Gregos

λ :	comprimento de onda.	$[cm]$
λ :	livre caminho médio.	$[cm]$
$\nu(\mathbf{r})$:	velocidade escalar de propagação dos nêutrons.	$[cm/s]$
ρ :	reatividade.	
σ_a :	seção de choque microscópica de absorção.	$[barns]$
σ_f :	seção de choque microscópica de fissão.	$[barns]$

σ_s :	seção de choque microscópica de espalhamento.	[<i>barns</i>]
σ_t :	seção de choque microscópica total.	[<i>barns</i>]
Σ_a :	seção de choque macroscópica de absorção.	[<i>cm</i> ⁻¹]
Σ_f :	seção de choque macroscópica de fissão.	[<i>cm</i> ⁻¹]
Σ_s :	seção de choque macroscópica de espalhamento.	[<i>cm</i> ⁻¹]
Σ_t :	seção de choque macroscópica total.	[<i>cm</i> ⁻¹]
Φ :	fluxo angular.	

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1	Espalhamento elástico [Handbook, 1993].	7
2.2	Espalhamento inelástico [Handbook, 1993].	7
2.3	Fissão do Urânio-235 [MEC].	8
2.4	Feixe de nêutrons incidindo em uma placa [Lamarsh, 1966].	9
2.5	Fissão do Urânio-235 [Lamarsh, 1966].	10
2.6	Fissão em cadeia do Urânio-235 [MEC].	13
2.7	Elemento de volume dV [Duderstadt, 1979].	16
2.8	Volume arbitrário V com superfície de área S [Duderstadt, 1979].	17
3.1	Desenho esquemático para os intervalos de probabilidade [Duderstadt, 1979].	24
3.2	Função distribuição cumulativa $P(x)$ [Duderstadt, 1979].	26
4.1	Meio composto de duas regiões de materiais distintos.	29
4.2	Espectro de Nêutrons não normalizado da Fissão do ^{235}U fornecido pela bibliografia [Cramberg, 1956].	30
4.3	Espectro de Nêutrons da Fissão do ^{235}U fornecido pelo simulador.	31
4.4	Seção de choque de fissão do U-235 e sua parametrização para um pequeno intervalo de energia.	32
4.5	Seção de choque de fissão do U-235 e sua parametrização.	34
4.6	Seção de choque de espalhamento elástico do U-235 e sua parametrização.	35
4.7	Seção de choque de captura radiativa do U-235 e sua parametrização.	35
4.8	Seção de choque de fissão do U-238 e sua parametrização.	36
4.9	Seção de choque de espalhamento elástico do U-238 e sua parametrização.	36
4.10	Seção de choque de captura radiativa do U-238 e sua parametrização.	37
4.11	Seção de choque de espalhamento elástico do oxigênio e sua parametrização.	37
4.12	Seção de choque de captura radiativa do oxigênio e sua parametrização.	38

4.13	Seção de choque de espalhamento do hidrogênio e sua parametrização.	38
4.14	Seção de choque de captura radiativa do hidrogênio e sua parametrização.	39
4.15	Típico caminho aleatório de uma partícula em um meio.	39
4.16	Direção da partícula no espaço [Bell, 1970].	40
4.17	Ilustração de um meio dividido em volumes e em destaque o volume de controle.	43
4.18	Ilustração das bifurcações entre os meios.	44
4.19	Fluxograma do programa Continuous.	46
5.1	Densidade de nêutrons ao longo do tempo em unidades de passos Monte Carlo no volume de controle, mantendo o número de subvolumes constante.	48
5.2	Densidade de nêutrons ao longo do tempo em unidades de passos Monte Carlo no volume de controle, variando o número de subvolumes.	50
5.3	Desenho ilustrativo de um meio dividido em sete camadas.	52
5.4	Densidade de interações na camada 8. As arestas tem 10cm de comprimento e a espessura da camada é 10cm/16, com o uso dos volumes de controle.	53
5.5	Isolinhas da densidade de interações para a camada 8 no centro do cubo. Arestas tem 10 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.	53
5.6	Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento onde os volumes de controle são usados.	54
5.7	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento, volumes de controle são usados.	54
5.8	Densidade de interações na camada 8. As arestas tem 10cm de comprimento e a espessura da camada é 10cm/16, sem o uso dos volumes de controle.	55
5.9	Isolinhas da densidade de interações para a camada 8 no centro do cubo. Arestas tem 10 cm de comprimento, sem a utilização dos volumes de controles.	55
5.10	Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.	56
5.11	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.	56
5.12	Densidade de interações na camada 8. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é 30cm/16, com o uso dos volumes de controle.	58

5.13	Isolinhas da densidade de interações para a camada 8 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.	58
5.14	Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle são usados.	59
5.15	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle são usados.	59
5.16	Densidade de interações na camada 8. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, sem o uso dos volumes de controle.	60
5.17	Isolinhas da densidade de interações para a camada 8 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento, sem a utilização dos volumes de controles.	60
5.18	Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.	61
5.19	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.	61
5.20	Densidade de interações na camada 12. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, com o uso dos volumes de controle.	62
5.21	Isolinhas da densidade de interações para a camada 12 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.	62
5.22	Número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle são usados.	63
5.23	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle são usados.	63
5.24	Densidade de interações na camada 12. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, sem o uso dos volumes de controle.	64
5.25	Isolinhas da densidade de interações para a camada 12 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento, sem a utilização dos volumes de controles.	64
5.26	Número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.	65
5.27	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.	65

5.28	Densidade de interações na camada 16. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, com o uso dos volumes de controle.	66
5.29	Isolinhas da densidade de interações para a camada 16 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.	66
5.30	Número de nêutrons por volume da camada 16 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle são usados.	67
5.31	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 16 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle são usados.	67
5.32	Densidade de interações na camada 12. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, sem o uso dos volumes de controle.	68
5.33	Isolinhas da densidade de interações para a camada 16 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento, sem a utilização dos volumes de controles.	68
5.34	Número de nêutrons por volume da camada 16 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.	69
5.35	Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 16 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.	69
5.36	Identificação do ciclo de nêutrons em passos Monte Carlo.	71
5.37	Distribuição da energia ao longo dos passos.	72
5.38	k Monte Carlo espectral ao longo dos passos.	72
5.39	Identificação do ciclo de nêutrons em passos Monte Carlo.	73
5.40	Mudança no espectro de energia dos nêutrons após uma sequência de passos Monte Carlo.	74
5.41	Fator de multiplicação espectral ao longo dos passos Monte Carlo.	74

ÍNDICE DE TABELAS

5.1	Alguns resultados do programa para meios cúbicos de diferentes tamanhos de arestas para um número fixo de subvolumes.	49
5.2	Alguns resultados do programa para meios cúbicos de arestas iguais a 30 cm para tamanhos de subvolumes diferentes.	51
I.1	Estudo comparativo entre os resultados obtidos utilizando as parametrizações das seções de choque com os resultados obtidos pelo uso de arquivos de dados nucleares avaliados para as seções de choque.	84
II.1	Valores do incremento médio de letargia por colisão para diferentes materiais.	88

1. INTRODUÇÃO

O aumento da demanda de energia e o problema relacionado com o clima têm, ao lado de outras, a opção de despertar a energia nuclear como um caminho possível para fora da problemática como as previstas perspectivas futuras, como a escassez de energia elétrica, os aumentos de preços dos combustíveis fósseis, o aquecimento global e as emissões de metais pesados na utilização de combustíveis fósseis, entre outros. Estimativas indicam que dentro das próximas duas décadas o consumo de energia elétrica vai dobrar, o que implica, além de outras possibilidades, em um aumento de usinas nucleares.

Reações nucleares controladas em um reator nuclear são um dos recursos energéticos que podem contribuir para atender a demanda crescente de energia mencionada acima, minimizando o impacto sobre o meio ambiente. Por causa de sua liberação eficiente de energia por reação nuclear em relação aos processos que envolvem reações químicas, por exemplo (que diferem por mais de oito ordens de magnitude), o controle e a segurança dos reatores é uma questão crucial. Evidentemente, ao projetar concepções novas de reator, o microscópio, bem como o macroscópico, do processo nuclear devem ser entendidos em seus detalhes e descritos adequadamente em termos de modelos matemáticos, juntamente com dados experimentais, como as seções de choque de reação nuclear[Sekimoto, 2007].

A experiência adquirida ao longo da história nuclear tem reforçado as regras e regulamentos que levam ao comissionamento de tecnologia de última geração nuclear. Uma das questões é a exploração das leis da física em favor do inerente controle do reator. Embora exista uma variedade de aspectos que devam ser levados em conta, o presente trabalho tem seu foco sobre a questão da influência do espectro de energia de nêutrons, e de propriedades nucleares, com a sua dependência energética contínua em um modelo estocástico que modela a neutrônica. A dependência energética contínua é, portanto, o principal progresso em comparação com abordagens que fazem uso de grupos de energia, muitas vezes apenas dois, o grupo rápido e térmico.

A física das reações nucleares, que ocorrem em um reator de potência, e sua influência

sobre o fluxo de nêutrons por perturbações de dentro ou de fora do sistema são conhecidas razoavelmente bem, mas ainda há muito que ser estudo. Conhece-se muito bem o fluxo de nêutrons no caso onde não há dependência de energia, ou nos casos onde o método de multigrupos de energia é utilizado. Mas a influência da energia de forma contínua no comportamento dos nêutrons, e em grandezas físicas importantes em estudos de reatores, ainda é pouco explorada. No entanto, com a presente contribuição será mostrado que ainda há espaço para o progresso, que se manifesta em uma variedade de recentes tentativas de criar algoritmos eficientes e adequados para os cálculos das populações de nêutrons, além de outras quantidades relevantes em cálculos de reatores nucleares.

A operação de um reator nuclear envolve dois tipos de problemas, o estado estacionário em que a produção de energia é constante e a alteração nas ações como partida (“start-up”), desligamento (“shut-down”) ou mudanças no nível de potência. Enquanto no estado de equilíbrio um reator está operando em ou perto da criticalidade, ou seja, o fator de multiplicação de nêutrons k é quase igual à unidade, as mudanças na potência são caracterizadas pela reatividade $\rho = (k - 1)/k$ [Lake, 2002; Lamarsh, 1966]. Note que a reatividade é convenientemente uma quantidade definida matematicamente, mas não pode ser medida diretamente na prática. No entanto, a multiplicação de nêutrons ou a reatividade dependem de diversas variáveis, tais como a temperatura do núcleo do reator, a sua composição química e também, como a discussão a seguir irá mostrar, a energia. Normalmente, um mesmo fator de multiplicação e reatividade são utilizados em toda a faixa de energia. Especialmente em situações de variação de potência, o espectro de energia do nêutron muda, assim como as quantidades físicas, tais como as seções de choque médias. Portanto, para modelar essas situações uma descrição espectral de k e, conseqüentemente, de ρ é necessária, o que é a principal novidade da presente contribuição.

Em geral, pode-se abordar o problema através de métodos analíticos, numéricos ou estocásticos[Bodmann, 2010; Camargo, 2009; Leppanen, 2005]. Uma vez que a dependência energética das seções de choque mostra oscilações nas regiões das ressonâncias, as implementações analíticas ou numéricas das equações de transporte de nêutrons são menos adequadas. Nessas implementações normalmente se trabalha com grupos de energia, onde se faz a média das seções de choque ao longo do respectivo intervalo de energia e, portanto, precisariam de mecanismos para corrigir as alterações espectrais. Deste ponto de vista, o

mais indicado é utilizar o método de Monte Carlo [Spainer, 1969], mas enfrenta-se a tarefa de simular um número exorbitante de nêutrons, que na prática é impossível sem o auxílio de um super computador, e esse problema tem de ser contornado de outra maneira. No presente trabalho resolveu-se esse problema por uma dependência espacial do tamanho do volume de controle.

A simulação de Monte Carlo desenvolvida nesta tese é uma implementação física que utiliza uma avaliação interativa de um modelo determinístico, o qual é baseado em números aleatoriamente distribuídos de acordo com densidades de probabilidade específicas. Esta técnica torna-se eficaz quando o modelo é complexo e não linear, ou quando envolve um elevado número de condições (como a geometria, com limites e interfaces, alteração da composição química dos materiais), ou então quando a integral envolve muitas dimensões. No código de transporte de partículas desta presente tese, a técnica de Monte Carlo registra cada uma das partículas ao longo de sua trajetória até algum evento terminal como captura radiativa, fuga do meio, entre outros. Neste trabalho, a implementação Monte Carlo toma suas instruções de uma equação de transporte de nêutrons integro-diferencial, em três dimensões e com uma verdadeira dependência energética (ou seja, sem grupos de energia). O tratamento dado aos espectros das seções de choque é um dos aspectos que diferencia este trabalho dos demais conhecidos na literatura[Bodmann, 2010; Goncalves, 2010; Vilhena, 2008]. Aqui as seções de choque são funções contínuas de energia, e são obtidas por parametrizações e codificadas como procedimentos do programa. O tipo de interação que um nêutron vai sofrer, e as características de seu deslocamento no meio, são aleatoriamente estimados pelo uso das distribuições de probabilidades relevantes.

A fim de tornar efetiva a simulação, o meio é dividido em vários volumes menores, onde dois desses volumes são selecionados e desempenham o papel de volumes de controle. Estes pequenos elementos de volumes são escolhidos para reconstruir a distribuição suave de nêutrons para todo o volume. A implementação dos volumes de controle no meio é um aspecto inovador, em comparação com trabalhos já existentes [Stamatelatos, 1977; Zimmerman, 1991; X-5, 2003], e faz uso de um número fixo de nêutrons, que são inseridos em um volume de controle específico. Sua vantagem é que o número de nêutrons pode ser significativamente reduzido, enquanto ainda obtém-se uma boa simulação. A variação nos volumes de controle é também utilizada para simular os processos de criticalidade diferentes. Neste tra-

balho mostra-se como o método funciona em conjunto com os primeiros resultados, e deixa-se para o futuro uma análise detalhada para os casos mais realistas em relação à geometria e composição material, o que é necessário para a física de reatores nucleares.

Para tal, a presente tese está organizada da seguinte forma: No capítulo 2 são introduzidos os conceitos relevantes para a implementação do Monte Carlo como um modelo estocástico para o transporte de nêutrons. No capítulo 3, a geração de números aleatórios com as distribuições de probabilidade são apresentadas. No capítulo 4, o volume de controle ajustável, os espectros de energia e o processo para gerar as trajetórias e vértices são explicados. No quinto capítulo, alguns resultados da simulação são discutidos e no capítulo 6 são apresentadas as nossas conclusões.

2. FÍSICA DE REATORES

O funcionamento de um reator nuclear é baseado em propriedades microscópicas da matéria, ou seja, como que o nêutron interage com o núcleo atômico. É necessário, portanto, considerar a natureza das interações com alguns detalhes. De fato há duas interações relevantes: a forte e fraca. Nêutrons interagem com o núcleo via a interação forte. Os decaimentos alfa que acontecem num reator também têm origem na interação forte, enquanto os decaimentos beta são explicados pela interação fraca. Na literatura muitas vezes as interações relevantes são chamadas de interação nuclear forte e nuclear fraca para enfatizar que o alcance desta interação é curto, ou seja, se restringe à dimensão do núcleo ou nucleon. Nesta seção serão apresentados alguns conceitos relevantes para este estudo, outros conceitos encontram-se no Apêndice II.

2.1 NÊUTRON COMO PARTÍCULA

As partículas na natureza exibem duplo comportamento, comportando-se tanto como partícula individual quanto como onda. Na *Teoria de Transporte* o nêutron é considerado como partícula, no sentido em que o nêutron pode ser descrito completamente por sua posição e velocidade. A natureza ondulatória do nêutron não é relevada porque o comprimento de onda do nêutron, em geral, é muito menor do que as dimensões envolvidas na teoria de transporte.

O comprimento de onda λ associado à partícula, que tem momento p , é dado por [Lamarsh, 1966; Walecka, 2008]

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (2.1)$$

onde h é a constante de Planck. É comumente usado o comprimento de onda reduzido, denotado por $\bar{\lambda}$, o qual é simplesmente o comprimento de onda dividido por 2π . Assim, $\bar{\lambda}$

pode ser escrito como

$$\lambda = \frac{\hbar}{p}, \quad (2.2)$$

onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π . Para nêutrons, a equação (2.2) resulta em

$$\lambda = \frac{4,55 \times 10^{-10}}{\sqrt{E}} \text{ cm}, \quad (2.3)$$

onde E é a energia do nêutrons dada em eV ($1 \text{ eV} = 1,6 \times 10^{-19} \text{ joule}$). Este comprimento de onda reduzido, dado pela equação (2.3), é menor do que as dimensões físicas envolvidas na teoria de transporte, ou seja, isto faz com que as características típicas do comportamento ondulatório não sejam exibidas e o nêutron pode ser tratado como uma partícula.

2.2 INTERAÇÃO DO NÊUTRON COM A MATÉRIA

O nêutron pode interagir de várias maneiras com a matéria [Glasstone, 1952; Sekimoto, 2007], mas a possibilidade de haver ou não uma dada interação vai depender das características do material (seções de choque). As possíveis interações são:

- *Espalhamento Elástico*: Dois processos compõem o espalhamento elástico de nêutrons. O primeiro é conhecido como processo de *captura* ou *ressonância* e neste o nêutron é absorvido pelo núcleo alvo e reemitido em outra direção com a mesma energia. O segundo processo é chamado de espalhamento elástico *potencial*, onde o nêutron não penetra no alvo, isto é, não interage com os nucleons, mas é espalhado pelo potencial criado pelas forças nucleares nas proximidades do núcleo. No espalhamento elástico, demonstrado na Figura 2.1, a energia cinética total (nêutron+núcleo) não é modificada pela interação. Durante a interação, uma fração da energia cinética do nêutron é transferida para o núcleo, que recua, como requer a conservação do momento.
- *Espalhamento Inelástico*: No espalhamento inelástico, ilustrado na Figura 2.2, a energia cinética (nêutron+núcleo) não se conserva, parte da energia do nêutron é absorvida e leva o núcleo alvo ao estado excitado. O núcleo excitado, posteriormente, decai pela emissão de fóton, especificamente, a emissão de raio gama, e o nêutron, por sua vez, é reemi-

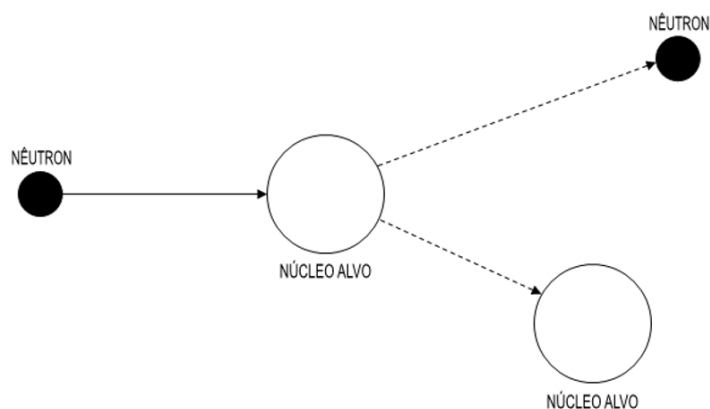


Figura 2.1 – Espalhamento elástico [Handbook, 1993].

tido com menor energia e em diferente direção, de acordo com a conservação de energia (nêutron+núcleo+fóton) e de momento. A quantidade de energia transferida para o alvo pode variar de alguns eV até toda a energia cinética do nêutron. Assim, o espalhamento inelástico exerce grande importância na moderação da energia de nêutrons rápidos dentro do reator. Não há espalhamento inelástico a menos que a energia do nêutron incidente seja próximo ao primeiro estado excitado do núcleo alvo.

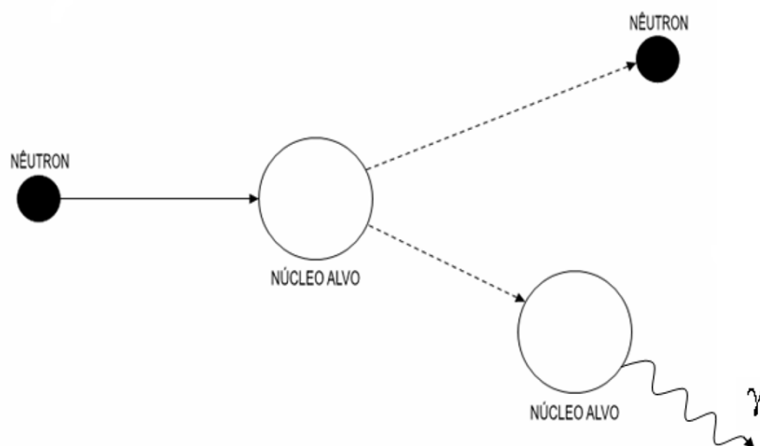


Figura 2.2 – Espalhamento inelástico [Handbook, 1993].

- *Reação de Absorção*: Nêutrons incidentes podem ser capturados em um reator como resul-

tado da reação de absorção. Na *captura radiativa*, denotada por (n, γ) , o nêutron incidente é absorvido com posterior emissão de radiação γ . Nêutrons também podem ser absorvidos pelas reações envolvendo partículas carregadas, como (n, p) e (n, α) .

- *Reação de Fissão*: Na fissão, um nêutron é absorvido criando uma instabilidade no núcleo; essa instabilidade ocasiona uma divisão do núcleo, geralmente, em dois fragmentos. Na Figura 2.3 se pode observar o processo de fissão do urânio-235 (^{235}U), que ao ser bombardeado com um nêutron se fissiona em dois pedaços menores, emitindo em média 2,43 nêutrons por cada nêutron absorvido. A massa total dos fragmentos e dos nêutrons produzidos na fissão é menor do que a massa do átomo de urânio inicial, mas essa massa diferença de massa é transformada em energia. A energia da fissão surge, na sua forma mais aparente, como energia cinética dos nêutrons e outros produtos de fissão ejetados e na radiação gama que acompanha o processo.

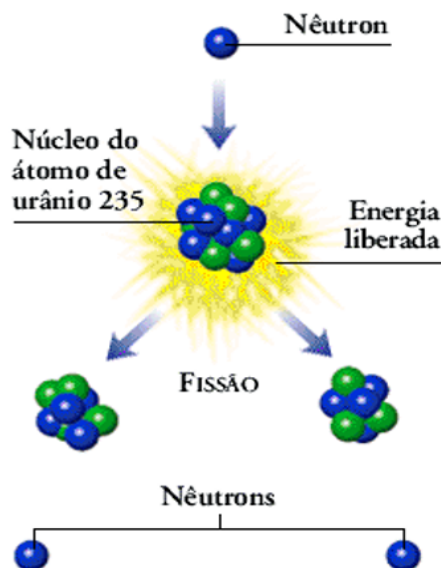


Figura 2.3 – Fissão do Urânio-235 [MEC].

2.2.1 SEÇÕES DE CHOQUE

As interações de nêutrons com a matéria são descritas em termos de uma quantidade conhecida como *seção de choque* [Lamarsh, 1966] que é definida do seguinte modo: considere um placa estreita (alvo) de área A e espessura X , contendo N átomos por unidade de volume

(densidade atômica), distribuídos uniformemente. Este alvo é atingido por um feixe uniforme e monodirecional de nêutrons de intensidade I , conforme a Figura 2.4.

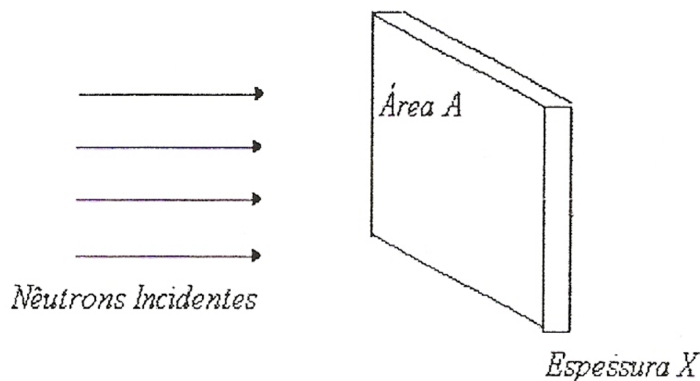


Figura 2.4 – Feixe de nêutrons incidindo em uma placa [Lamarsh, 1966].

Com arranjo demonstrado na Figura 2.4 se obtém que a *taxa de interação* é proporcional à intensidade do feixe incidente, à área, à espessura e à densidade atômica da placa alvo, onde se pode resumir essa observação na seguinte equação:

$$\text{Taxa de Interação} = \sigma INAX; \quad (2.4)$$

onde a constante de proporcionalidade σ é conhecida como *seção de choque*, e sua unidade de medida é *barns*. Reorganizando a equação 2.4 se tem a seguinte expressão para a seção de choque

$$\sigma = \frac{\text{Taxa de Interação}}{INAX}. \quad (2.5)$$

Observando que NAX é o número total de átomos no alvo, segue, portanto, que σ é a *taxa de interação por átomo do alvo por unidade de intensidade do feixe incidente*.

Outra interpretação pode ser dada quando se observa que IA nêutrons se dirigem ao alvo por segundo e destes somente $\sigma INAX$ nêutrons colidem com o alvo. A probabilidade que um dos nêutrons interaja com o alvo por unidade de área é dada por

$$\text{Probabilidade de Interação} = \frac{\sigma INAX}{IA}, \quad (2.6)$$

sendo que NX é o número de átomos do alvo por unidade de área, então σ é a *probabilidade*

de interação de um nêutron do feixe com o núcleo do alvo.

Os nêutrons interagem com o núcleo de diferentes modos e é conveniente descrever cada tipo de interação em termos da seção de choque característica. Assim, o espalhamento elástico é descrito pela *seção de choque de espalhamento elástico*, σ_s , a captura radiativa pela *seção de choque de captura radiativa*, σ_a , etc. A soma das seções de choque para todas possíveis interações é conhecida como *seção de choque total* e é denotada pelo símbolo σ_t , logo neste estudo a seção de choque total é dada por: $\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a + \sigma_f$.

2.2.2 INTERAÇÃO DE NÊUTRONS COM A MATÉRIA E SEÇÃO DE CHOQUE MACROSCÓPICA

Suponha que um alvo de espessura X é colocado em frente a um feixe de nêutrons incidente monodirecional de intensidade I_0 . Será suposto que todo o nêutron que interagir com o alvo se perderá do feixe monodirecional e não será detectado pelo detector. Essa situação se encontra ilustrada na Figura 2.5.

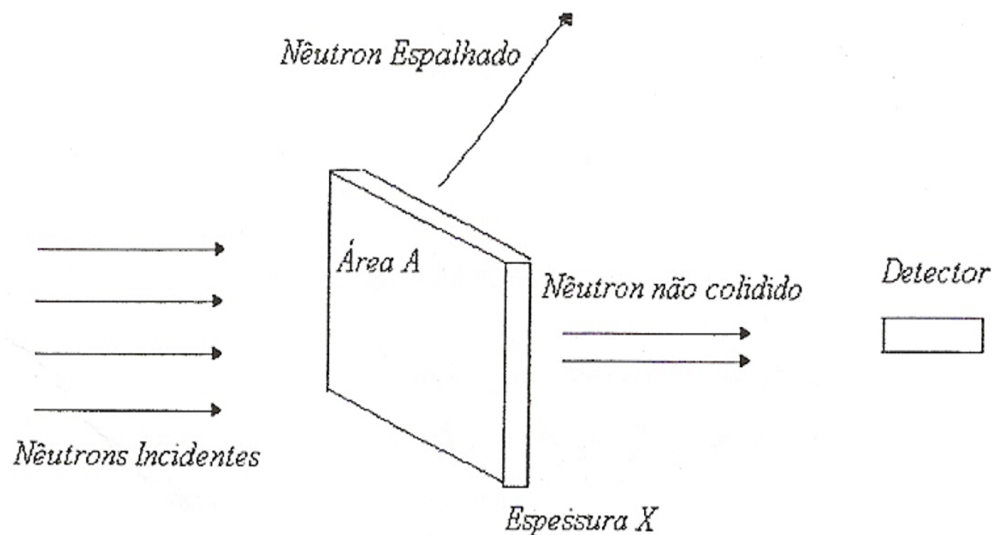


Figura 2.5 – Fissão do Urânio-235 [Lamarsh, 1966].

Considerando $I(x)$ a intensidade do feixe de nêutrons que não interagiram após a penetração de uma distância x no alvo, ao atravessar a distância adicional dx , a intensidade do feixe irá decrescer devido a interação em dx . Em vista da equação (2.4), este decréscimo

será dado por

$$-dI(x) = N\sigma_t I(x)dx, \quad (2.7)$$

onde N é a densidade atômica do alvo. A seção de choque total pode ser usada na equação (2.7) porque está se considerando que todo nêutron que interage com o alvo é removido do feixe monodirecional. A equação (2.7) quando integrada resulta em

$$I(x) = I_0 e^{-N\sigma_t x}. \quad (2.8)$$

A intensidade do feixe de nêutrons que não interagem com o alvo decresce exponencialmente com a distância de penetração dos nêutrons no alvo. A intensidade do feixe de nêutrons que não interagiram e que emergem do alvo de espessura X , ou seja, a intensidade que é medida pelo detector, é dada por

$$I(X) = I_0 e^{-N\sigma_t X}. \quad (2.9)$$

O produto da densidade atômica pela seção de choque ($N\sigma$), o qual aparece na equação (2.9), ocorre frequentemente em teoria de reatores e é conhecido como *seção de choque macroscópica total*, a qual é denotada pelo símbolo Σ_t e sua unidade é cm^{-1} . Rearranjando a equação (2.7) e usando a definição de Σ_t se obtém

$$\frac{-dI(x)}{I_x} = \Sigma_t dx. \quad (2.10)$$

A quantidade $\frac{dI(x)}{I_x}$ na equação (2.10) é igual à fração de nêutrons que, tendo penetrado uma distância x no alvo sem interagir, subsequentemente interage na distância dx . Assim, $\Sigma_t dx$ é a probabilidade que um nêutron interaja em dx , e segue que Σ_t é a probabilidade por unidade de comprimento que um nêutron sofra alguma interação.

Retornando à equação (2.8) e levando em conta o fato de que $I(x)$ se refere aos nêutrons que não interagiram ao penetrar a distância x no alvo, logo a razão

$$\frac{I(x)}{I_0} = e^{-\Sigma_t x} \quad (2.11)$$

é a probabilidade de que um nêutron possa viajar uma distância x sem interagir. Assim, a

probabilidade de que um nêutron tenha sua primeira interação em dx , na vizinhança de x , que é representada por $p(x)$, é dada por

$$p(x)dx = e^{-\Sigma_t x} \Sigma_t dx. \quad (2.12)$$

A distância média entre duas interações é conhecida como *livre caminho médio*, a qual é usualmente designada pelo símbolo λ e pode ser determinada por

$$\lambda = \int_0^{\infty} xp(x)dx \quad (2.13)$$

$$\lambda = \Sigma_t \int_0^{\infty} xe^{-\Sigma_t x} dx = \frac{1}{\Sigma_t}, \quad (2.14)$$

onde se pode observar que o livre caminho médio é o inverso da seção de choque macroscópica total. O λ tem, naturalmente, unidade de comprimento (*cm*).

2.3 FISSÃO EM CADEIA

O processo de fissão em cadeia, como mostrado na Figura 2.6, estudado por Enrico Fermi, levou ao princípio básico dos reatores nucleares chamados reatores térmicos, por terem a fissão produzida por nêutrons térmicos. A física de reatores é uma ciência de fundamentos complexos, a qual utiliza a teoria de transporte de nêutrons.

Uma das principais características da fissão induzida por nêutrons é a possibilidade da reação ser realizada em cadeia. No caso do ^{235}U , em cada evento de fissão se libera em média 2,43 nêutrons, por cada nêutron térmico absorvido. Estes nêutrons podem induzir novas fissões, dando origem à *reação em cadeia*. O processo criado por Fermi foi o de realizar esta reação de forma controlada, dando lugar a um reator, caso contrário se teria um processo de dinâmica supercrítica, ou seja, com crescimento exponencial de liberação de energia.

A pilha de Fermi, construída na Universidade de Chicago, tinha como combustível nuclear o urânio natural, o grafite era o moderador e o controle da população de nêutrons era feito por cádmio ou boro. O calor gerado era retirado por convecção do ar que circulava livremente entre as barras de combustível. Mesmo que se utilizem outros materiais e tecnologias mais sofisticadas, essa ainda é a base do que se chama reator térmico.

Para que a reação em cadeia seja auto-sustentada pelos nêutrons produzidos na

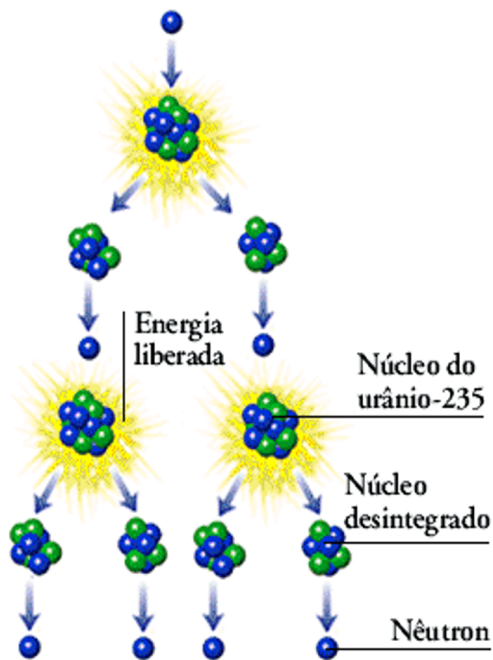


Figura 2.6 – Fissão em cadeia do Urânio-235 [MEC].

fissão, é preciso que, daqueles 2,43 nêutrons, sobre pelo menos um para produzir uma reação de fissão em cadeia. Assim, todas as reações de captura radiativa tanto no combustível como em todos os outros materiais, bem como as fugas para o exterior competem com a reação de fissão. Considerando a razão entre o número de nêutrons produzidos entre gerações contíguas do processo de reação em cadeia, pode-se definir o fator de multiplicação de nêutrons k [Sekimoto, 2007]:

$$k = \frac{\text{número de nêutrons produzidos em uma geração}}{\text{número de nêutrons produzidos na geração antecedente}}. \quad (2.15)$$

Quando se pode assumir que um reator é infinitamente grande e a fuga de nêutrons do mesmo é zero, o fator de multiplicação é chamado de *fator de multiplicação de nêutrons para um meio infinito* e é denotado por k_{∞} . É conveniente o uso do k_{∞} para expressar características do material. Se o tamanho do reator nuclear não pode ser considerado infinitamente grande, se tem conseqüentemente fugas de nêutrons do reator, portanto não se pode utilizar mais o k_{∞} e sim se passa a utilizar o *fator de multiplicação efetivo de nêutrons*, designado por k_{eff} .

Analisando o fator de multiplicação efetivo de nêutrons se pode classificar um reator nuclear como:

- Crítico: quando $k_{eff} = 1$, ou seja, o número de fissões permanece o mesmo e portanto também a potência térmica do reator;
- Sub-crítico: quando $k_{eff} < 1$, o reator nessa condição apaga após um certo tempo de funcionamento;
- Super-crítico: quando $k_{eff} > 1$, isso ocorre quando o reator inicia seu funcionamento e se quer aumentar a sua potência, mas para isso o valor utilizado, por motivo de segurança, é muito pequeno, como por exemplo 1,00001. Um caso super-crítico pode provocar acidentes.

A escolha de diferentes composições de materiais pode agora ser explicada, pois no caso do Fermi, o conjunto urânio natural e grafite permite obter facilmente um valor de $k_{eff} > 1$. Nos reatores PWR e BWR o conjunto de materiais é bem mais complexo, mas se pode dizer que ao utilizar a água como moderador o urânio deve ser enriquecido para que k_{eff} seja maior que a unidade, mas se for utilizada água pesada como moderador, então pode-se usar urânio natural como combustível.

2.4 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN

A atenção agora será para o problema central da teoria envolvida em um reator nuclear, a determinação da distribuição de nêutrons no reator. É a distribuição de nêutrons que determina a taxa na qual várias reações nucleares ocorrem dentro do reator. Além disso, estudando o comportamento da população de nêutrons se pode deduzir a estabilidade da reação de fissão em cadeia. Para determinar a distribuição de nêutrons no reator tem-se de investigar o processo de transporte nêutrons, ou seja, o comportamento dos nêutrons no núcleo do reator, frequentemente espalhados pelo núcleo atômico e eventualmente absorvidos ou então escapando para fora do reator. A maioria dos estudos trata o movimento do nêutron como um processo de difusão. A modelagem desse processo é dada pela teoria da difusão, a qual é uma versão simplificada da teoria de transporte. Esta versão simplifica o cálculo da variação espacial da distribuição neutrônica, ignorando a sua dependência angular, e impondo uma direção preferencial aos nêutrons através da lei de Fick [Duderstadt, 1979]. Nesse processo de difusão se assume que os nêutrons tendem a se difundir a partir de regiões de alta densidade de nêutrons para baixa densidade nêutrons, assim são reduzidas as variações na

concentração espacial. Porém, com estas simplificações a teoria não oferece bons resultados para pontos situados próximos às fontes e fronteiras físicas, não podendo ser aplicada em pequenos sistemas, como células de reatores, onde cálculos precisos são fundamentais.

Infelizmente, o tratamento difusivo tem validade limitada. A razão para esta falha é facilmente compreensível quando se observa que a maioria dos processos de difusão são caracterizados por partículas que sofrem colisões muito frequentemente as quais resultam em muitas irregularidades, em trajetórias ziguezague. No entanto, tem-se visto que a seção de choque para colisões de nêutrons é muito pequena (cerca de 10^{-24} cm^2). Consequentemente, os nêutrons tendem a percorrer distâncias relativamente grandes entre as interações (recordando que o livre caminho médio característico para nêutrons rápidos é tipicamente da ordem de centímetros). Além disso, as dimensões características do núcleo de um reator são geralmente comparáveis ao livre caminho médio do nêutron (por exemplo, uma vareta de combustível nuclear tem cerca de 1 cm de diâmetro). Portanto, se requer uma descrição mais precisa do transporte de nêutrons.

Como consequência dos repetidos caminhos ziguezague, nêutrons que foram originados em uma parte do reator e se movendo em uma determinada direção, com uma energia particular, aparecem mais tarde, em outra parte do sistema, movendo-se em outra direção com alguma outra energia. Neste caso, considera-se que os nêutrons tenham sido transportados a partir da primeira região e energia para a segunda, e o estudo desse fenômeno é conhecido como teoria transporte. A teoria de transporte é relativamente simples, em princípio, e uma equação exata que governa fenômenos de transporte pode ser facilmente obtida. Esta equação é chamada de *equação de transporte de Boltzmann* [Duderstadt, 1979]. O estudo da teoria de transporte é essencial no estudo dessa equação. Infelizmente, é muito mais fácil derivar a equação de transporte de Boltzmann do que resolvê-la.

2.4.1 DERIVAÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN

A equação de transporte de Boltzmann [Duderstadt, 1976] é uma equação integro-diferencial que representa o balanço de nêutrons num volume diferencial.

A definição de fluxo angular para um estado estacionário é dado por

$$\textit{Fluxo Angular} = vN(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \equiv \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E), \quad (2.16)$$

onde ν é a velocidade escalar de propagação do nêutron, N é a densidade de nêutrons (que é o número provável de nêutrons por unidade de volume por unidade de ângulo sólido e por unidade de energia). Assim, define-se o fluxo angular como o número provável de nêutrons num ponto \mathbf{r} , viajando na direção do ângulo sólido Ω e com energia E . A equação de transporte pode ser derivada usando o balanço de nêutrons num elemento de volume dV , o qual está exemplificado na figura 2.7.

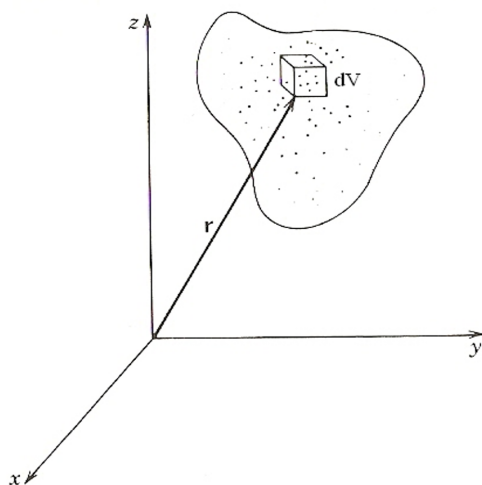


Figura 2.7 – Elemento de volume dV [Duderstadt, 1979].

Nêutrons com energia E e direção Ω podem ser introduzidos dentro do elemento de volume dV pelos seguintes processos:

1) Nêutrons podem “nascer” dentro de dV com particulares energia e direção, devido a uma fonte localizada em dV .

2) Nêutrons podem entrar em dV com energia e direção, vindos de regiões espaciais adjacentes.

3) Nêutrons de outras direções ou energias podem sofrer interações dentro de dV de modo que os nêutrons são espalhados para a direção Ω e energia E .

De modo similar, nêutrons com energia E e direção Ω podem ser removidos deste elemento diferencial de volume pelos seguintes processos:

4) Nêutrons podem sofrer uma interação em que sejam absorvidos ou que mudem de direção ou energia.

5) Nêutrons podem deixar dV e entrar numa região espacial adjacente.

No estado estacionário, a perda de nêutrons no elemento de volume dV , com energia E e direção Ω , deve ser igual ao ganho de nêutrons nesse elemento. Assim, o item (1) representa uma fonte externa. A combinação dos itens (2) e (5) representa a diferença entre o fluxo angular que sai e o que entra no elemento de volume espacial dV , com direção Ω e energia E . Para desenvolver este termo, tem-se que analisar o fluxo de nêutrons através de uma área dA infinitesimal e fechada, que envolve um volume dV , como esquematizado na figura 2.8. Este fluxo é dado por

$$\text{Corrente de Nêutrons Cruzando } dA = \hat{\mathbf{n}} \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dA d\Omega dE, \quad (2.17)$$

$\hat{\mathbf{n}}$ é um vetor unitário no sentido de saída desse elemento de área fechado. Se integrar a equação (2.17) em um incremento de área, se tem

$$\text{Corrente Angular líquida de Nêutrons Cruzando } \Delta A \text{ Fechada} = \int_{\Delta A} \hat{\mathbf{n}} \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dA d\Omega dE. \quad (2.18)$$

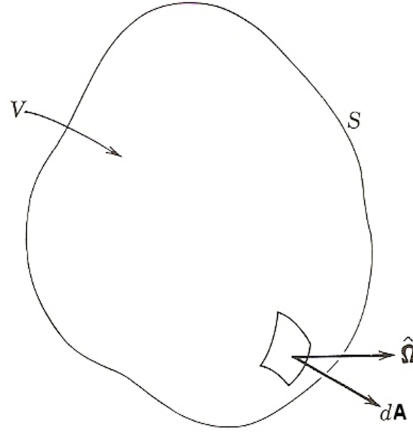


Figura 2.8 – Volume arbitrário V com superfície de área S [Duderstadt, 1979].

Pelo teorema do divergente

$$\int_{\Delta A} \hat{\mathbf{n}} \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dA = \int_{\Delta V} \nabla \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dV; \quad (2.19)$$

E assim, $\int_{\Delta V} \nabla \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dV d\Omega dE$ representa a diferença entre o fluxo angular

de nêutrons que sai e o que entra no incremento de volume ΔV (com energia E e direção Ω). Se considerar que ΔV tende ao dV , a função $\nabla \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dV d\Omega dE$ se torna constante com respeito a r e assim,

$$\lim_{\Delta V \rightarrow dV} \int_{\Delta V} \nabla \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dV d\Omega dE = \nabla \cdot \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dV d\Omega dE. \quad (2.20)$$

Portanto, este termo representa a diferença entre a saída e a entrada do fluxo angular de nêutrons no elemento de volume espacial dV , com energia e direção específicas.

O item (4) diz que nêutrons podem sofrer interações e serem removidos pelas mudanças de energia e direção. Pela definição de seção de choque macroscópica, pode-se ver que este termo é representado por

$$\Sigma_t \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) dV d\Omega dE. \quad (2.21)$$

O termo remanescente, relativo ao item (3), expressa a probabilidade de espalhamento de nêutrons com energia E' e direção Ω' para energia dE em torno de E e direção $d\Omega$ em torno de Ω . Tal termo é escrito na forma

$$\sigma \int \int [f(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E) \Phi(\mathbf{r}, \Omega', E') d\Omega' dE'] dV d\Omega dE, \quad (2.22)$$

em que

$$\sigma f(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E) = \sum_x \sigma_x f_x(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E), \quad (2.23)$$

onde o subscrito x indica o tipo de interação do nêutron. Como exemplo, $\sigma_s f_s(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$ é a seção de choque diferencial do espalhamento elástico, sendo que $f_x(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$ é a função probabilidade de um nêutron que tem energia E' e direção Ω' passar a ter energia E e posição Ω após a interação. Com isto, a equação de transporte de nêutrons pode ser escrita da forma

$$\Omega \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \Sigma_t \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E) = \sigma_s \int \int f(\Omega', E' \rightarrow \Omega, E) \Phi(\mathbf{r}, \Omega', E') d\Omega' dE' + S(\mathbf{r}, \Omega, E). \quad (2.24)$$

A equação de transporte de Boltzmann foi desenvolvida nesta seção para o regime

estacionário, isto é, independente do tempo. Quando se introduz a dependência temporal, a equação (2.24) é reescrita como

$$\frac{1}{v} \frac{d}{dt} \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + \Sigma_t \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) = \sigma_s \int \int f(\boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t) d\boldsymbol{\Omega}' dE' + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t). \quad (2.25)$$

onde v é a velocidade escalar do nêutron, e os limites de integração são todas as direções espaciais e todas as energias possíveis para os nêutrons.

3. O MÉTODO DE MONTE CARLO NO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS

3.1 MONTE CARLO COMPARADO À OUTRAS ABORDAGENS NUMÉRICAS

Equações de transporte com uma variedade de processos a serem considerados, que tornam a solução das equações um desafio, são difíceis de serem resolvidas. Existe um método que permite implementar processos elementares de forma estocástica, que podem ser somados no ensemble para caracterizar o processo total. Esse método é conhecido como método Monte Carlo Físico. De certa forma este método simula uma sequência de processos microscópicos, semelhantes aos processos que ocorrem na realidade, por meio de relações de probabilidades, as quais modelam a física do problema. Essas relações determinam a trajetória do nêutron e as possíveis interações que ele sofrerá ao longo do seu percurso no meio [Brown, 2004].

Os métodos de Monte Carlo nada mais são do que algoritmos numéricos que utilizam a geração de números aleatórios, conforme certas distribuições probabilísticas, que decidem em cada jogada qual a realização para uma variável aleatória [Brown, 2005; Zimmerman, 1991]. Quaisquer situações que envolvam processos aleatórios, como a simulação de amostras aleatórias, ou mesmo aqueles que não têm caráter probabilístico [Murata, 1996], como uma simples integração numérica, podem utilizar dos métodos de Monte Carlo. Vários experimentos em Física de Altas Energias [FOWL, 1993; GEANT] foram projetados, realizados e analisados à luz de programas de computação que utilizam Monte Carlo, por causa da sua eficácia para aplicações com certas dificuldades como, por exemplo, a dimensão elevada de um espaço de coordenadas de um ensemble de partículas e outros.

Se forem usados n números aleatórios no cálculo, por meio do Monte Carlo, de uma dada variável de interesse, a resposta terá uma precisão proporcional a $n^{-1/2}$. Para estudos de problemas que envolvem uma dimensão baixa não é considerada vantajosa a utilização dos métodos de Monte Carlo em comparação a outros métodos numéricos, mas se o problema a ser analisado envolver mais dimensões, com uso do Monte Carlo irá se obter

resultado com convergência mais rápida, uma vez que, nesses casos, a precisão dos métodos numéricos de ordem k têm erro que escala conforme $M^{-k/d}$, onde d é o número de dimensões do problema e M o número de discretizações, e no Monte Carlo o erro da precisão continua sendo proporcional a $n^{-1/2}$. Desta forma para $d > 2k$ o método Monte Carlo se torna mais eficaz que o outros métodos numéricos [Santoro, 2001].

Cada vez que se estima quantitativamente a mesma função, se obtém um número ligeiramente diferente. No entanto, pode-se associar à essa diferença um erro. Na prática, o erro obtido pode ser muito pequeno, satisfazendo plenamente os objetivos do problema. O termo função usado neste parágrafo se refere a qualquer quantidade de se deseja estimar, como o valor de uma integral, o peso associado a algum evento na teoria de transporte, entre outros.

O erro estatístico do método de Monte Carlo depende de dois fatores: da variância σ^2 (ver Apêndice II.5) do valor da função a ser estimado e do número de pontos aleatórios para os quais a função é avaliada. O caminho mais simples para diminuir o erro é aumentar n , pois como já foi visto, o erro é proporcional a $1/\sqrt{n}$, mas esse caminho é limitado pelo tempo de computação, que torna o cálculo cada vez mais proibitivo com o aumento de n . Existem uma variedade de alternativas para decrescer a variância, como mudar a distribuição utilizada dos números aleatórios. Neste caso, certos intervalos de números são gerados com mais frequência que outros, de maneira que otimizem o cálculo da função a ser estimada. Uma relação de métodos mais completa é além do escopo da presente discussão, sendo tópicos referentes a estas técnicas específicas apresentados nas referências [Thijsen, 1999; Woolfson, 1999; Hartmann, 2002]. Uma maneira de diminuir o tempo de computação, utilizada na presente implementação, é ter em arquivos conjuntos de números (pseudo-)aleatórios gerados conforme uma distribuição estabelecida. No caso da presente implementação utilizam-se distribuições de energia dos nêutrons e distribuições de fuga de nêutrons oriundas de simulações anteriores para esta finalidade. Assim, evita de gerar números insignificantes para o cálculo da função a ser estimada, diminuindo o tempo de processamento do mesmo.

3.2 SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS POR MEIO DE MONTE CARLO

Problemas de transportes são comumente encontrados em aplicações práticas muito complexas, devido às condições de contornos complexos, variedade de possíveis processos competitivos, processos transientes e outros, de modo que soluções numéricas diretas da equação de transporte não se tornam uma ferramenta recomendável para obter uma solução aceitável de forma eficaz. Nessas situações, normalmente se apóia em Monte Carlo [Brown, 2005; Duderstadt, 1979; Lewis, 1984; Thijsen, 1999; Woolfson, 1999; Hartmann, 2002] ou métodos de amostragem estatística para simular o processo de transporte, ou seja, geralmente se desenvolve uma descrição estatística no computador, análoga à história de vida da partícula, usando métodos de amostragem aleatória. As experiências a que uma partícula é submetida desde o seu surgimento até ser absorvida no meio ou então escapar deste meio é chamada de história.

Então, acompanhando um grande número dessas histórias, os resultados podem ser analisados para obter estimativas do comportamento esperado da população de partículas. Processos de transporte de partículas são muito propícios a este tipo de tratamento, uma vez que os eventos individuais de interações são geralmente descritos em termos das características estatísticas (livres caminhos médios ou seções de choque). Se fosse possível determinar o caminho exato que cada partícula realiza em um meio material se poderia, em princípio, calcular muitas quantidades úteis com o resultado da média de um grande número de histórias individuais de partículas. Por exemplo, a probabilidade de uma partícula ser absorvida em um dado volume específico seria estimada computando a proporção de todas as partículas que foram absorvidas no volume específico. Esta concepção de usar um grande número de histórias de partículas para calcular o comportamento médio das partículas é a característica essencial dos métodos de Monte Carlo.

Em modelagem probabilística, a idéia é atacar o problema físico diretamente, obtendo um modelo aproximado do fenômeno físico exato, e será adotada nesta tese. Neste sentido, então, os métodos de Monte Carlo podem ser definidos como métodos de simulação estatística de alguns modelos probabilísticos ou analógicos de um dado problema, levando a denominação de Monte Carlo Físico. No entanto, métodos de Monte Carlo também podem ser usados para resolver problemas determinísticos, como a avaliação de integrais definidas

ou então solução de equações diferenciais ou integrais, nestes casos o método recebe o nome de Monte Carlo Matemático. De fato, as duas abordagens têm sido aplicadas com sucesso em problemas de transporte de partículas que podem ser caracterizadas tanto como um processo aleatório (pela especificação das probabilidades de interações relevantes), ou como um problema determinístico (descrita pela equação de transporte de partícula caracterizando a densidade de partícula do espaço fase).

A aplicação de métodos de Monte Carlo para a simulação direta dos fenômenos de transporte de partícula é conceitualmente bastante simples (embora a lógica da programação ou até mesmo um código computacional de Monte Carlo para uma simples “analogia física” se torne bastante complexo). Precisa-se entretanto modelar a física relevante de cada evento de interação da partícula o mais semelhante possível, permitindo as partículas fluírem livremente entre os vértices das interações. Não se utiliza a equação de transporte, diretamente, pois o balanço de partículas entre os vários eventos e as fugas é simulado numericamente, e tudo o que se necessita são as expressões matemáticas completas das relações de probabilidades para os diversos eventos possíveis, definidos previamente pelo modelo, o que simulará o comprimento da trajetória percorrida pela partícula até o ponto de interação e o evento que ocorrerá. A equação de transporte constituirá um modelo matemático que descreve o comportamento médio de toda a população de partículas, e não o de cada partícula individualmente.

Uma primitiva forma do método de Monte Carlo foi aplicada à equação de Boltzmann, já em 1901, o principal estímulo para o desenvolvimento de técnicas de Monte Carlo veio dos complicados problemas da difusão de nêutrons, que foram encontrados no início dos trabalhos sobre a energia atômica. Fermi estava entre os primeiros a aplicar métodos de amostragem aleatória para estudar moderação de nêutrons. O grande desenvolvimento de métodos de Monte Carlo, orientados para computadores, na solução de problemas de transporte foi fornecido por N. Metrópole e S. Ulamg em Los Alamos durante a década de 1940. A aplicação de métodos de Monte Carlo para a solução de equações integrais foi desenvolvida por Albertg e Spanier, e o desenvolvimento de esquemas de redução de variância foi iniciado com o trabalho de von Neumann, Ulam, e Kahn no início da década de 1950.

A idéia essencial ligada à utilização dos métodos de Monte Carlo para simular transporte de partículas é acompanhar uma série de histórias de nêutrons, utilizando números

aleatórios para determinar se e qual o tipo de interações ocorrerão ao longo do percurso do nêutron [Brown, 2005; Duderstadt, 1979].

Por exemplo, suponha que se sabe que um nêutron de energia E sofreu uma colisão em um ponto \mathbf{r} . Para determinar o tipo de colisão primeiro se calcula as probabilidades de captura radiativa, de fissão e de espalhamento, p_a , p_f e p_s , respectivamente, utilizando os apropriados dados das seções de choque [Duderstadt, 1976]:

$$p_a = \frac{\Sigma_c(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)}, \quad p_f = \frac{\Sigma_f(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)}, \quad p_s = \frac{\Sigma_s(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E)}. \quad (3.1)$$

Uma vez que $p_a + p_f + p_s = 1$, podemos dividir o intervalo real $[0,1]$ em segmentos proporcionais a estas probabilidades, como demonstrado na figura 3.1;

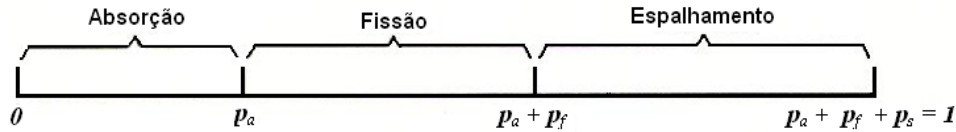


Figura 3.1 – Desenho esquemático para os intervalos de probabilidade [Duderstadt, 1979].

Agora basta escolher um “número aleatório”, ξ_i , a partir de uma sequência ou tabela de números reais positivos distribuídos uniformemente (igualmente prováveis) no intervalo $[0,1]$. Se o número ξ_i selecionado se situa no intervalo $0 \leq \xi_i < p_a$, o evento selecionado é o de captura radiativa; se $p_a \leq \xi_i < (p_a + p_f)$, então ocorre uma fissão; e se $(p_a + p_f) \leq \xi_i \leq 1$, identifica-se a interação como sendo um evento de espalhamento. Desta maneira, consegue-se selecionar aleatoriamente o tipo de interação de uma forma consistente com os conhecimentos de probabilidades de ocorrência para cada tipo de evento.

Se um evento de captura radiativa é escolhido, a história do nêutron se encerra. Mas se o evento escolhido é fissão ou espalhamento, tem-se que realizar mais um processo de “amostragem” para determinar o número e as características dos nêutrons resultantes dessas interações. Mais uma vez, teria-se que implementar um processo de amostragem aleatória o qual está baseado nas conhecidas probabilidades de emissão de nêutrons pela fissão ou de espalhamento de nêutrons.

Logo após ter determinado as consequências de um evento de colisão, calcula-se a

distância que o nêutron vai percorrer antes de sofrer a sua próxima colisão. Novamente, este processo envolve uma amostragem aleatória, mas agora mais sofisticada, uma vez que a probabilidade de interação do nêutron não está distribuída uniformemente ao longo da sua trajetória, ou seja, a probabilidade de colisão depende da distribuição do material ao longo da sua possível trajetória.

Ilustrando o que foi dito acima para um meio homogêneo, a probabilidade de que um nêutron possa sofrer uma interação em um intervalo dx em torno de x , para um meio uniforme, é dada por [Duderstadt, 1976]:

$$p(x)dx = \Sigma_t \exp(-\Sigma_t x)dx. \quad (3.2)$$

Esta probabilidade $p(x)$ é conhecida como função “distribuição” ou “densidade” de probabilidade. De modo que sua integral sobre todo x deve, evidentemente, ser igual a 1.

Calcula-se a probabilidade $P(x)$ [Duderstadt, 1976] que o nêutron possa sofrer uma interação antes de percorrer uma distância x pela integração de $p(x)$ de 0 a x [Duderstadt, 1976]:

$$P(x) \equiv \int_0^x dx' p(x') = 1 - \exp(-\Sigma_t x), \quad (3.3)$$

onde $P(x)$ é referida como função distribuição “cumulativa”. Nota-se que $P(x)$ é uma função monotonicamente crescente de x que varia de 0 a 1, enquanto x varia de 0 a ∞ , (ver a Figura 3.2). Portanto, para cada comprimento da trajetória x_i percorrido por um nêutron há uma única probabilidade de interação P_i (e vice-versa), ou seja, deverá ser possível (em princípio) inverter $P(x)$ para determinar x como uma função de P .

Uma vez que os valores de P_i são distribuídos dentro do intervalo $]0, 1[$, usam-se números aleatórios distribuídos uniformemente dentro do intervalo $]0, 1[$ como amostras de valores de P_i , então se calcula o correspondente ponto de interação x_i . Na realidade, se o ponto de interação x_i é distribuído de acordo com $p(x)$, os valores correspondentes P_i são distribuídos uniformemente no intervalo $]0, 1[$.

Pode-se então utilizar apenas números aleatórios para selecionar um valor para P_i e determinar [Duderstadt, 1976]

$$x_i = -\frac{\ln(1 - P)}{\Sigma_t} = -\frac{\ln(1 - \xi_i)}{\Sigma_t}, \quad (3.4)$$

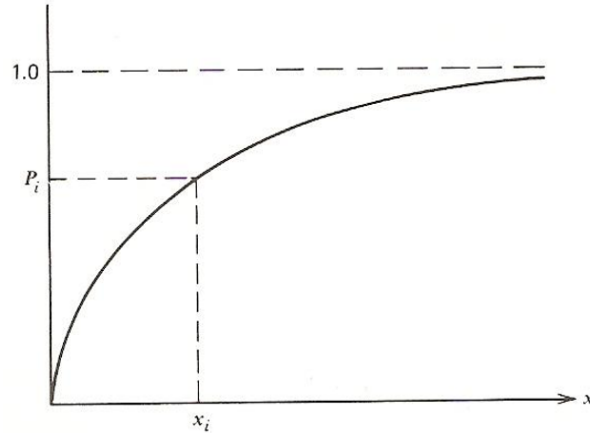


Figura 3.2 – Função distribuição cumulativa $P(x)$ [Duderstadt, 1979].

onde ξ_i é um número selecionado aleatoriamente dentro do intervalo $]0, 1[$

Na verdade, uma vez que a quantidade $(1 - P)$ é também distribuída uniformemente sobre o intervalo $]0, 1[$, é mais vantajoso determinar x utilizando [Duderstadt, 1976]

$$x_i = -\frac{\ln \xi_i}{\Sigma_t}. \quad (3.5)$$

Em muitos casos, a forma da função $P(x)$ é muito complicada para ser invertida explicitamente. Na realidade, ela pode estar disponível apenas em uma forma tabelada. Então, métodos de interpolação podem ser utilizados para obter $x = x(P)$.

Através do uso de sofisticados algoritmos de amostragem e métodos de programação inteligentes, códigos computacionais de Monte Carlo foram desenvolvidos para que se possa processar dezenas de milhares de histórias de partículas em geometrias complexas, permitindo um tratamento detalhado do espaço, energia, ângulo e fenômenos de transporte dependentes do tempo [Leppanen, 2005]. Vale ressaltar o fato de que vários outros problemas de transporte não podem ser estudados usando diretamente métodos de simulação através do método Monte Carlo Físico porque envolvem eventos que ocorrem com probabilidade muito reduzida. Por exemplo, problemas de blindagem, os eventos de maior interesse ocorrem muito raramente, às vezes com uma probabilidade muito baixa, próxima a 10^{-10} . A simulação direta de tais acontecimentos exigiria um enorme número de histórias (pelo menos elevado por um fator 10^{10} , enquanto simulações típicas envolvem $10^6 - 10^8$ realizações) e isto torna o uso do método Monte Carlo Físico impensável devido ao elevado tempo de

processamento.

Neste tipo de problemas físicos, a simulação direta não é suficiente; em vez disso, deve-se empregar regimes de redução de variância, no qual o problema original é modificado para que o evento de interesse ocorra com maior frequência. Desta forma a maior parte do tempo e custo de computação são gastos em casos que suscitam o evento de interesse, e não desperdiçados em casos menos relevantes.

Para desenvolver estes sistemas, é necessário partir de uma analogia física do problema para uma aplicação alternativa de métodos de Monte Carlo como um método estocástico para resolver a equação de transporte determinística. Isto é, métodos de Monte Carlo podem ser aplicados não apenas como um método estocástico para simular processos estocásticos, mas também como um método estocástico para resolver equações determinísticas, e é esta dupla capacidade que torna os métodos de Monte Carlo muito úteis em problemas de transporte. Em ambas as abordagens, a característica fundamental de um cálculo de Monte Carlo envolve a seleção de amostras aleatórias de distribuições de probabilidades específicas.

3.3 MÉTODO DE AMOSTRAGEM ALEATÓRIA

Observa-se que o aspecto fundamental da simulação Monte Carlo envolve a utilização de amostragem aleatória para gerar estimativas estatísticas da solução de problemas físicos e matemáticos.

Primeiro, necessita-se de uma grande oferta de números aleatórios, ξ_i , distribuídos uniformemente sobre o intervalo $[0,1]$. Uma variedade de métodos podem ser utilizados para gerar tabelas (aproximadamente) de números aleatórios. Estes vão desde geradores sofisticados de números aleatórios usados em programas modernos de computadores a métodos mais primitivos, como selecionar o último algarismo da lista de números de telefone em uma lista telefônica.

Um típico cálculo Monte Carlo normalmente necessita de muitos números aleatórios, de modo que uma tabela adequada desses números ocuparia uma grande parte da memória do computador. Portanto, Códigos computacionais de Monte Carlo geram números aleatórios quando eles são necessários, utilizam operações aritméticas, tais como o método multiplicativo congruencial. Tais regimes realmente geram apenas números (pseudo-)aleatórios, ou

seja, sequências de números aleatórios que irão se repetir depois de um grande número de amostras. Isto se deve ter em mente quando rodar problemas Monte Carlo muito grandes, uma vez que estes podem gerar bastantes histórias correndo o risco de repetir a sequência de números aleatórios, gerando assim amostras correlacionadas.

O programa desenvolvido nesta tese fez o uso do compilador gcc, do sistema operacional linux, e utilizou a função rand como gerador de números aleatórios, a qual é definida na biblioteca stdlib.

4. PROGRAMA PARA A SIMULAÇÃO NEUTRÔNICA

4.1 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

Neste trabalho descreve-se um modelo estocástico de simulação neutrônica para um meio tridimensional, composto de duas regiões distintas, ou seja, duas regiões constituídas por materiais diferentes, como mostrado na Figura 4.1. O fluxo neutrônico nesta abordagem é considerado em forma espectral, pois depende de forma contínua da energia. Em seguida serão apresentados os detalhes desenvolvidos neste trabalho para a determinação da criticalidade nuclear espectral considerando a influência da dependência contínua da energia.

Note-se que, daqui por diante, o atributo espectral será utilizado como sinônimo de dependência contínua de energia, ou seja, diferenciando a densidade de nêutrons com uma energia cinética específica num intervalo entre E e $E + dE$.

Considera-se vácuo como condição de contorno em todas as fronteiras do meio, assim apenas as fugas serão consideradas e não há nêutron entrando no meio a partir do ambiente externo às fronteiras que limitam o volume total de simulação.

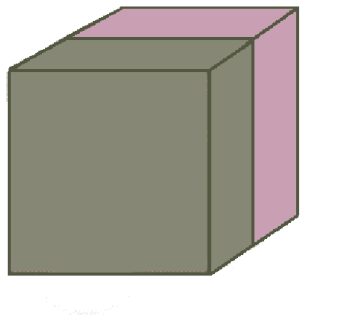


Figura 4.1 – Meio composto de duas regiões de materiais distintos.

Uma vez que o espectro dos nêutrons da fissão é o ponto de partida para todos os cálculos em reatores nucleares, uma função que descrevesse bem esse espectro se tornou

indispensável na simulação computacional de reatores nucleares. Neste estudo, a energia inicial dos nêutrons é fornecida pelo espectro dos nêutrons da fissão do U-235, o qual obedece a equação (4.1)

$$N(E) = 1765\sqrt{E} \exp(-0.775E), \quad (4.1)$$

onde $N(E)$ é o fluxo de nêutrons e E é a energia do nêutron em MeV [Cramberg, 1956].

Na Figura 4.2 encontra-se o espectro dos nêutrons da fissão do ^{235}U o qual obedece a equação (4.1) fornecida pela bibliografia, e a Figura 4.3 traz o espectro dos nêutrons da fissão do ^{235}U obtido por um programa que simula tal espectro através da função distribuição mencionada anteriormente. Na segunda figura o espectro é também normalizado, uma vez que ele foi obtida por meio de um histograma. O total de nêutrons gerados, para construir o histograma da Figura 4.3, é da ordem de 10^8 . Nota-se que o espectro obtido pelo simulador fornece uma fiel aproximação do espectro de nêutrons da fissão do ^{235}U fornecido pela bibliografia, o que valida a geração do espectro inicial implementada no programa.

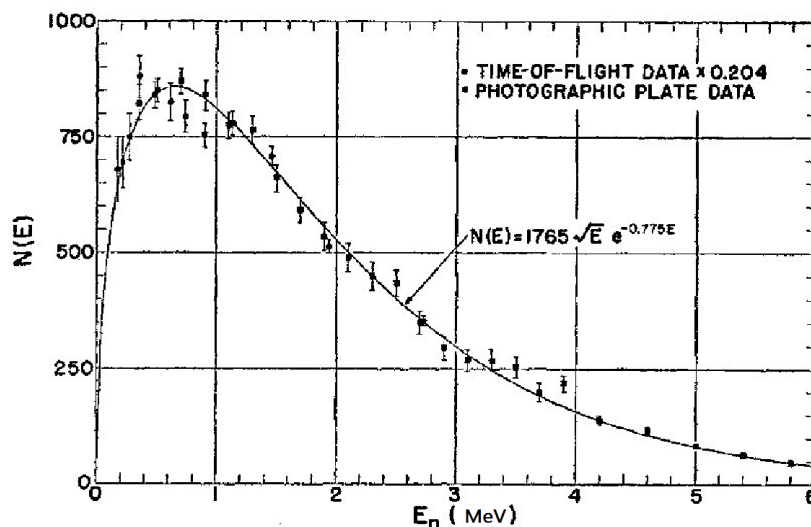


Figura 4.2 – Espectro de Nêutrons não normalizado da Fissão do ^{235}U fornecido pela bibliografia [Cramberg, 1956].

As energias para um número total de nêutrons inicialmente especificado, obtidas pelo programa que simula o espectro de nêutrons da fissão do ^{235}U , Figura 4.3, são armazenadas em um arquivo, o qual corresponde ao arquivo de energias iniciais dos nêutrons utilizados

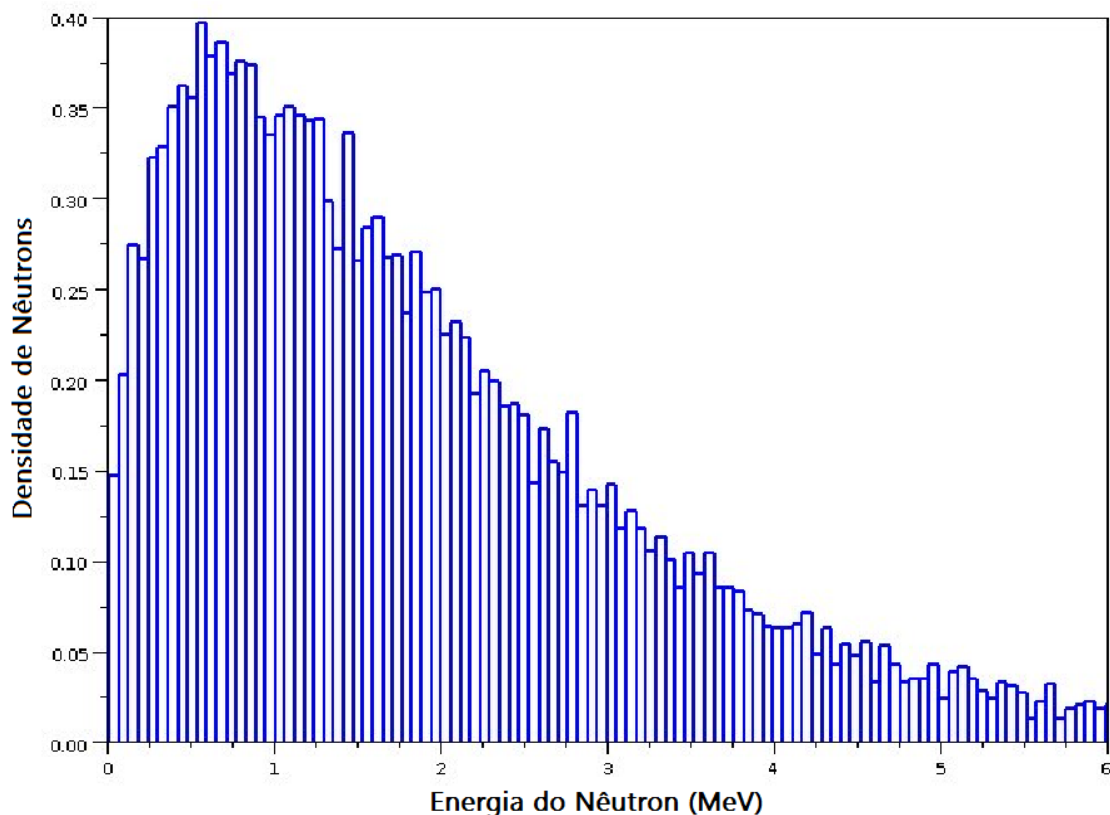


Figura 4.3 – Espectro de Nêutrons da Fissão do ^{235}U fornecido pelo simulador.

no programa desenvolvido nesta tese, o qual foi chamado de “Continuous”.

Num segundo passo preparativo, as seções de choque dos materiais que constituem o meio são parametrizadas em forma de funções analíticas, cujos parâmetros são ajustados utilizando os recursos de ajuste de curvas da biblioteca do programa Scilab [Scilab], com o auxílio do mesmo software geram-se os gráficos os quais permitem a visualização das seções de choque parametrizadas e a comparação das mesmas com os dados originais obtidos no site da Agência Internacional de Energia Atômica [AIEA]. Mais especificamente, divide-se o espectro em faixas de energia, para cada faixa de energia é encontrada, por meio de parametrizações, uma função contínua para as seções de choque que pertence a este intervalo específico. Então, cada faixa de energia terá uma função específica, como ilustrado na Figura 4.4. A linha preta, na Figura 4.4, é a seção de choque obtida pelos dados fornecidos no site da Agência Internacional de Energia Atômica, a qual tratamos aqui como sendo a seção de choque original. As linhas coloridas representam três funções, ou seja, três parametrizações, cada uma para um intervalo de energia bem definido. Observa-se que nesse intervalo obteve-

se uma aproximação sem desvios significativos.

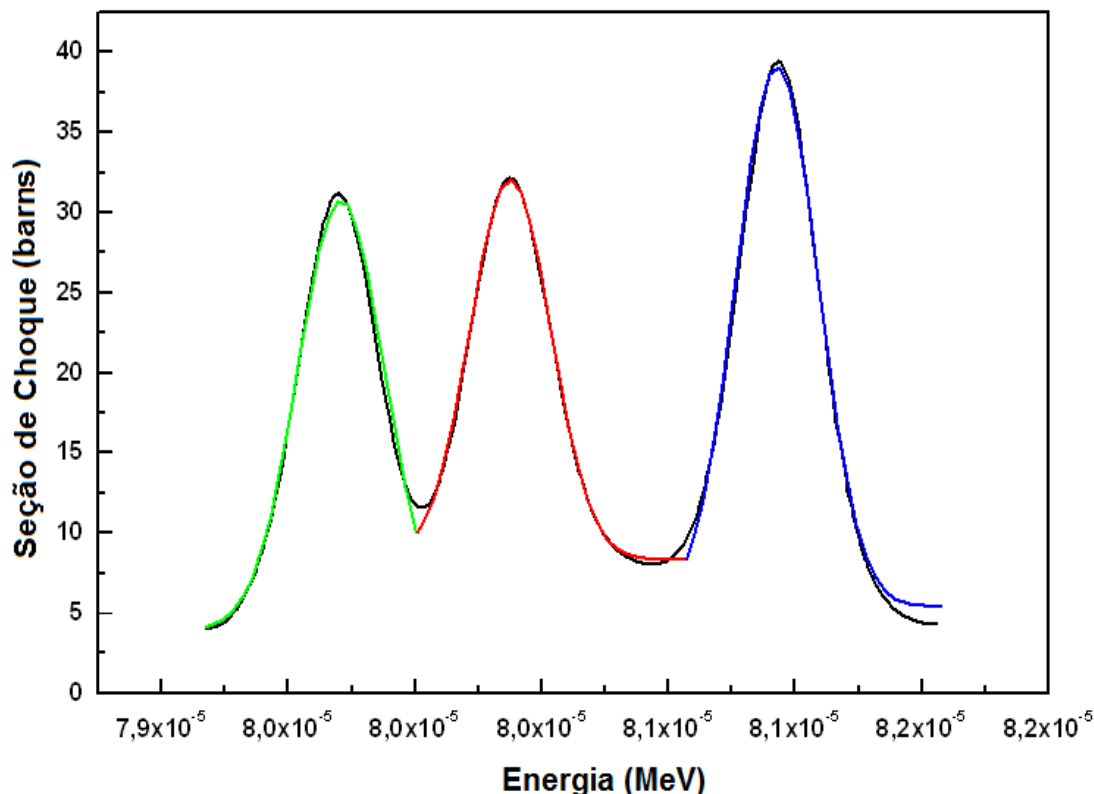


Figura 4.4 – Seção de choque de fissão do U-235 e sua parametrização para um pequeno intervalo de energia.

Quanto melhor a parametrização maior a precisão do método, assim cada atualização do banco de dados das seções de choque espectrais tornará o resultado mais próximo ao real. Isto difere dos procedimentos que utilizam o método de multigrupos, onde se tem um número limitado de grupos de energia. Devido a este fato, a distribuição de energia dentro de um grupo não é bem definida, apenas o valor médio deve ser reproduzido, o que em princípio permitiria ter uma variedade de distribuições. Desta forma observa-se que “soluções artificiais” seriam possíveis, as quais poderiam ser consideradas soluções válidas para a abordagem em grupos; porém serão excluídas quando a dependência contínua de energia for respeitada. A inclusão da dependência contínua da energia nas soluções talvez não melhore os resultados, porém vai indicar, entre outros, como a distribuição espectral influencia na criticalidade nuclear.

Uma vez estabelecida a parte que envolve a energia relevante para determinar a probabilidade de interação, deve-se então determinar as posições, ou seja, os vértices de interação, o que em princípio já foi introduzido no capítulo sobre o Monte Carlo (capítulo 3). Como volume em consideração trata-se de um meio heterogêneo (aqui duas regiões com composições químicas distintas), então falta implementar a função distribuição para a transição de um meio para outro, ou seja determinar a posição e o meio onde ocorrerá a próxima interação. Quando um nêutron passa de um meio hospedeiro para o outro uma ponderação é introduzida com o intuito de um caminho óptico. Devido ao fato que o tipo de interação e a próxima posição de interação serem determinados de acordo com as respectivas probabilidades, na região de transição se estabelece, via a média sobre o ensemble de nêutrons, também as respectivas médias de interação e comprimentos de propagação. Esta abordagem evita a implementação de probabilidades condicionais que serão necessárias para determinar simultaneamente o tipo de interação e o comprimento de propagação entre vértices sucessivos que se encontram em elementos de volumes com meios diferentes ao longo da trajetória. A ponderação nada mais é que uma relação entre a densidade atômica do material que constitui cada região do meio com o comprimento da parte correspondente da trajetória viajada em cada uma dessas regiões. Então para estes nêutrons que cruzam interfaces entre meios diferentes a posição é determinada para uma seção de choque microscópica “homogênea” e posteriormente é decomposta a seção de choque para determinar o tipo de interação que acontece. Utilizar probabilidades condicionais tem como consequência decompor a trajetória entre dois vértices sucessivos por elementos de propagação livre, que não contribui para as histórias acumuladas. Ademais, é preciso o cuidado para evitar contagem múltipla nas histórias, o que aumenta significativamente o tempo computacional, ou seja, limita o tamanho do ensemble utilizado.

Neste estudo, a primeira região do meio é composta por dióxido de urânio UO_2 , onde tem-se urânio enriquecido em 5%. Este elemento é caracterizado pelas seções de choque espectrais microscópicas do ^{238}U , do ^{235}U e do oxigênio, mostradas nas Figuras 4.5, 4.6, 4.7, 4.8, 4.9, 4.10, 4.11 e 4.12. A segunda região é composta de água (H_2O) e as seções de choque espectrais do hidrogênio e do oxigênio se encontram nas Figuras 4.13, 4.14, 4.11 e 4.12.

Como já mencionado anteriormente, a presente abordagem considera a dependência contínua da energia das seções de choque de forma analítica. Para este fim, as seções de

choque obtidas a partir de dados nucleares foram parametrizadas, o que resultou em uma descrição fiel da dependência energética das seções de choque com um erro $\lesssim 5\%$. Os resultados destas parametrizações (traçado preto) e a comparação com os dados originais (traçado azul) são mostrados nas figuras a seguir. As Futuramente pretende-se melhorar essas parametrizações e obter uma aproximação mais precisa ($\lesssim 1\%$), mas nesta tese o foco principal é mostrar que o método sugerido neste estudo é eficiente e traz resultados aceitáveis e confiáveis. Realizou-se durante o desenvolvimento deste trabalho, um estudo comparativo no qual se analisou os tempos de CPU obtidos pelo programa “Continuous” para dois casos diferentes, os resultados se encontram no Apêndice I. Verifica-se por meio deste estudo que os resultados obtidos em ambos os casos possuem a mesma ordem de grandeza, mas no caso onde as parametrizações foram usadas obteve-se um tempo de processamento muito que no caso onde essas parametrizações não foram utilizadas.

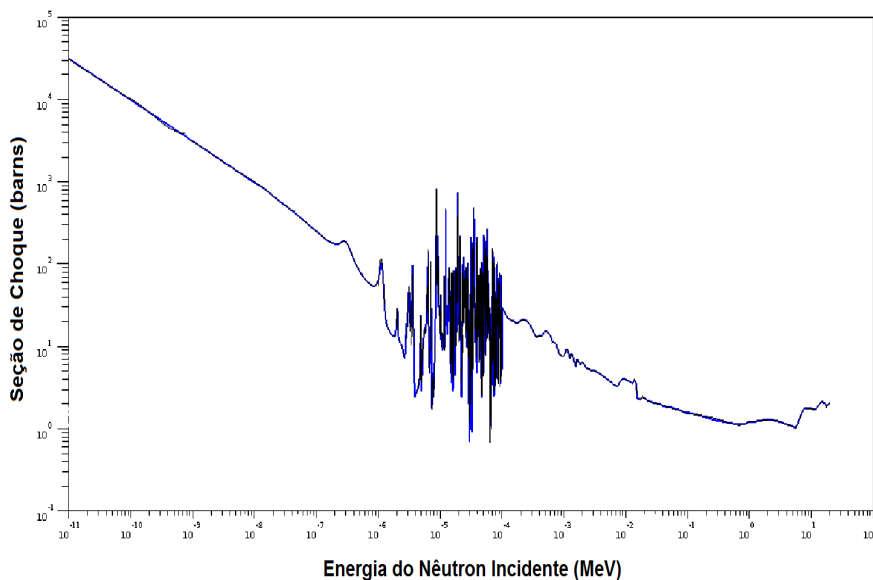


Figura 4.5 – Seção de choque de fissão do U-235 e sua parametrização.

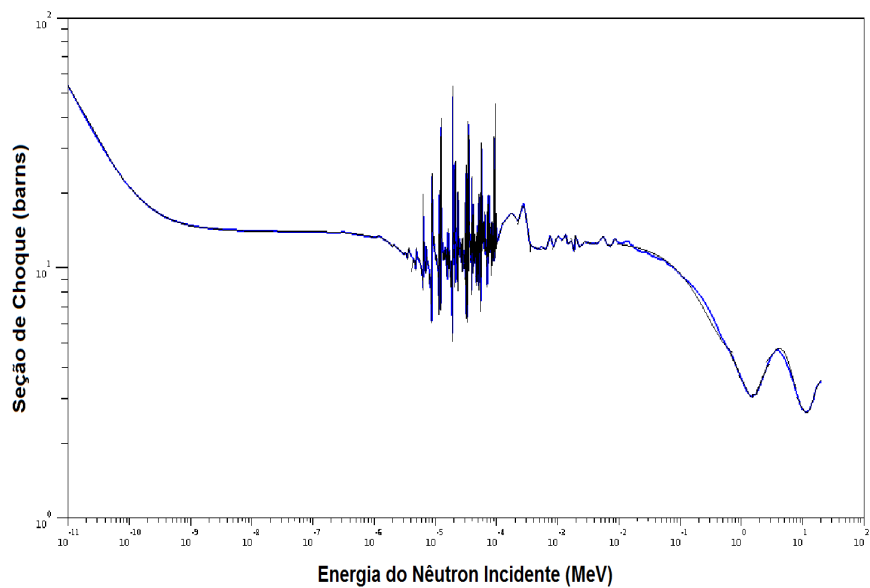


Figura 4.6 – Seção de choque de espalhamento elástico do U-235 e sua parametrização.

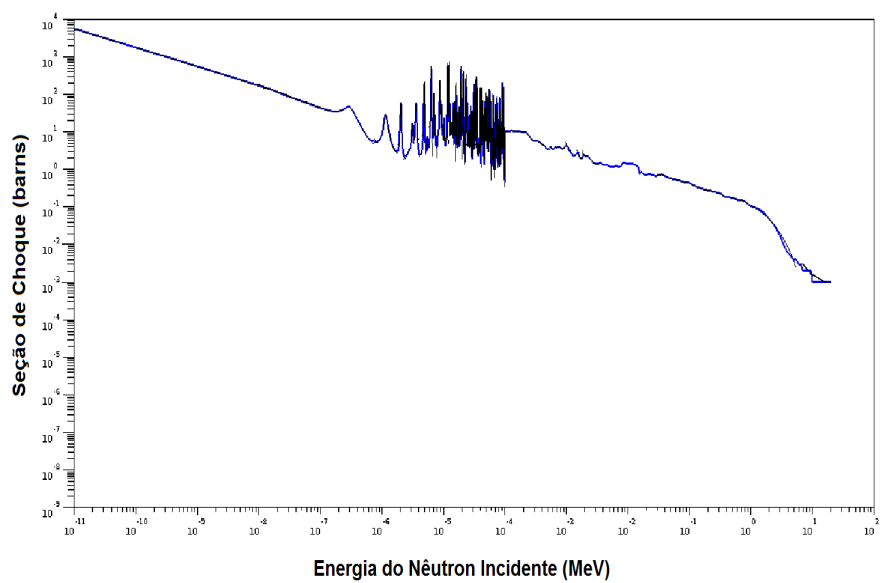


Figura 4.7 – Seção de choque de captura radiativa do U-235 e sua parametrização.

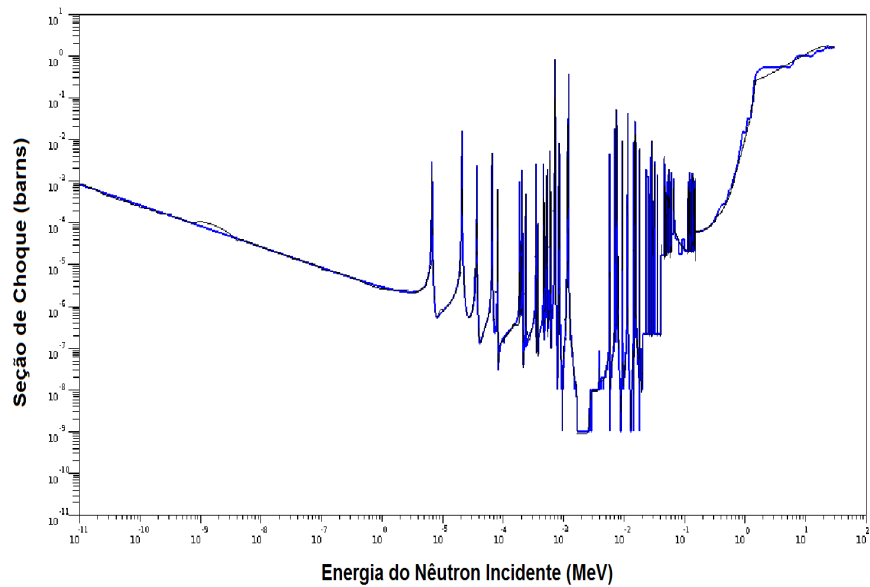


Figura 4.8 – Seção de choque de fissão do U-238 e sua parametrização.

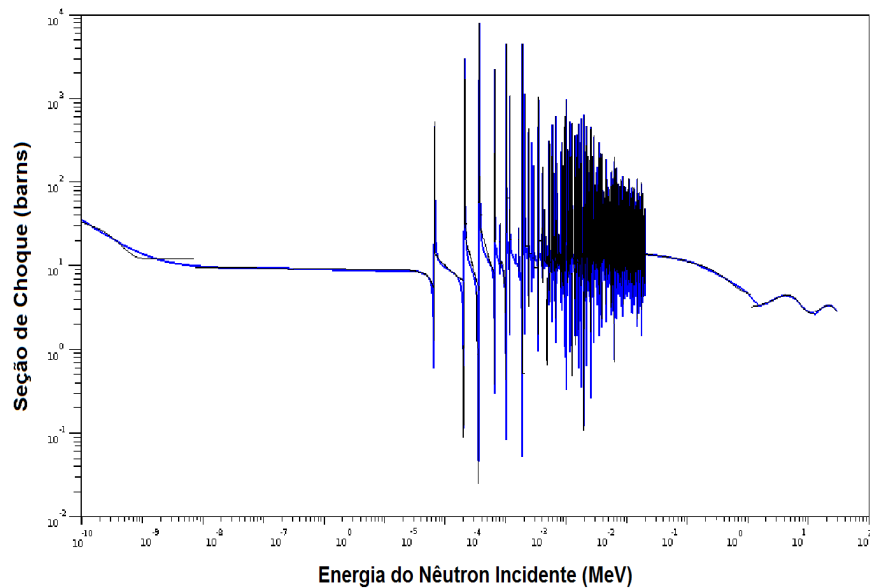


Figura 4.9 – Seção de choque de espalhamento elástico do U-238 e sua parametrização.

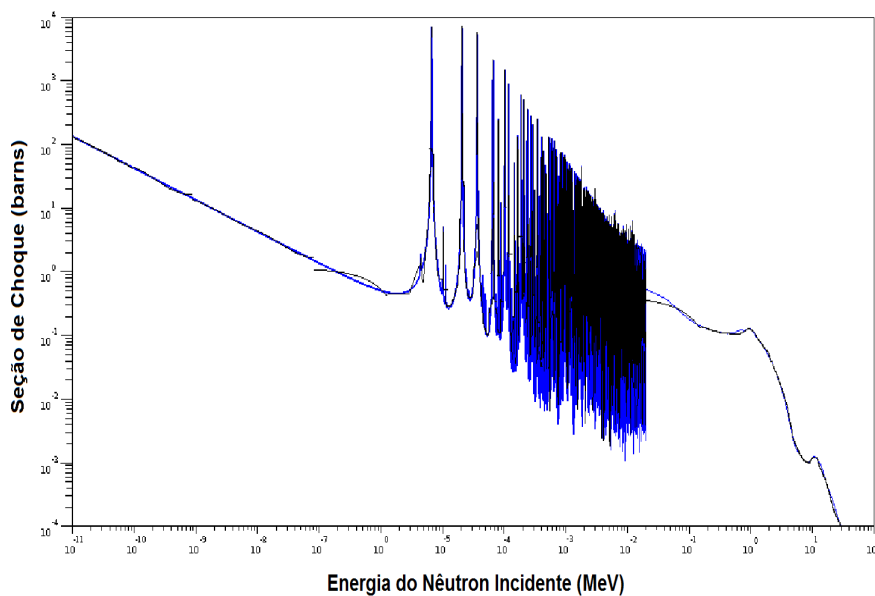


Figura 4.10 – Seção de choque de captura radiativa do U-238 e sua parametrização.

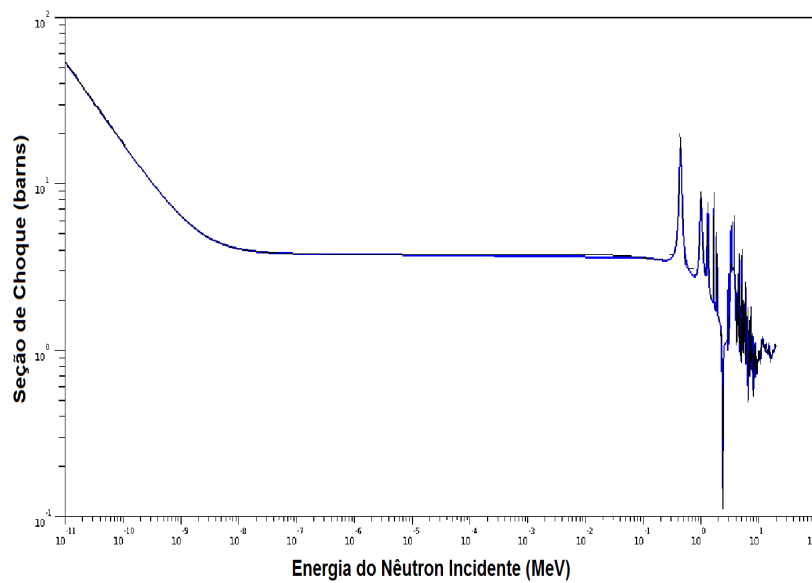


Figura 4.11 – Seção de choque de espalhamento elástico do oxigênio e sua parametrização.

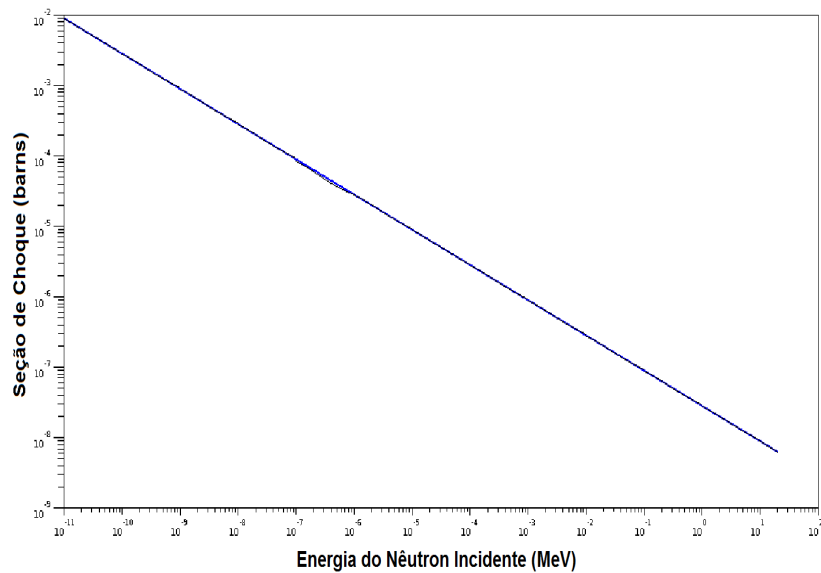


Figura 4.12 – Seção de choque de captura radiativa do oxigênio e sua parametrização.

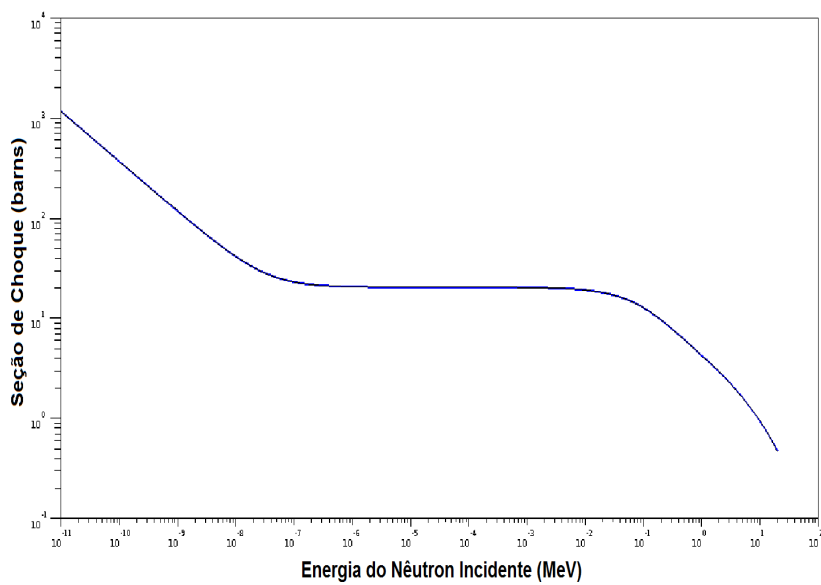


Figura 4.13 – Seção de choque de espalhamento do hidrogênio e sua parametrização.

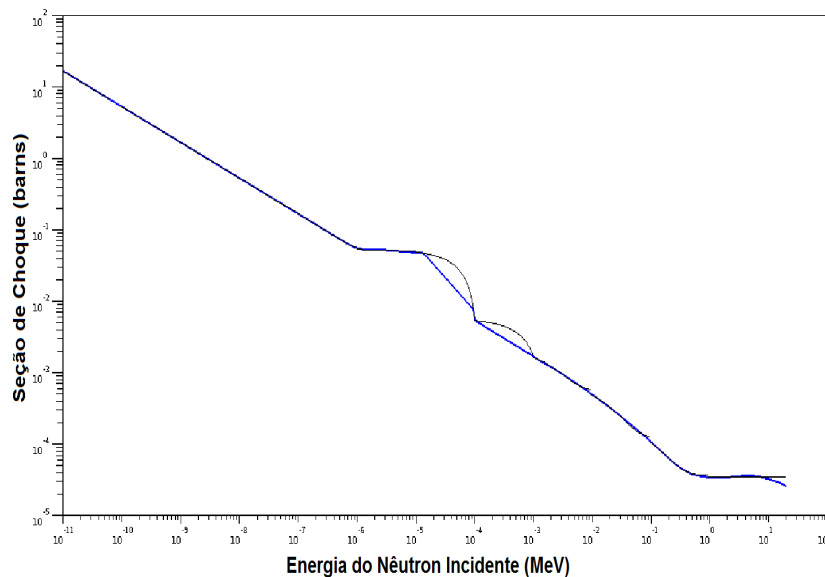


Figura 4.14 – Seção de choque de captura radiativa do hidrogênio e sua parametrização.

4.2 A TRAJETÓRIA DO NÊUTRON

Considera-se o caminho de uma partícula a qual está viajando através de um meio homogêneo. Visto que a partícula é frequentemente espalhada, um caminho zigzague é traçado por ela, conforme mostra a Figura 4.15.

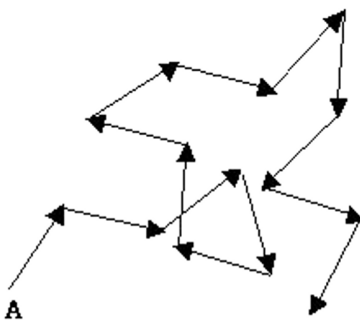


Figura 4.15 – Típico caminho aleatório de uma partícula em um meio.

A partícula é originada em *A* com conhecidas direção e energia. Esta tem uma propagação livre até sofrer uma colisão com um átomo do meio, a qual poderia resultar na absorção da partícula e o imediato término da sua história, mas se assume que uma interação de espalhamento ocorreu e a partícula continua sua trajetória, mas com uma nova direção

e nova energia. Estas variações da energia e da direção são processos estatísticos [Bell, 1970], isto é, não há uma única direção para seguir após o espalhamento, portanto há uma distribuição de probabilidade para cada uma dessas possíveis direções. Após o primeiro espalhamento, a mesma partícula realiza um vôo livre e experimenta outra colisão, e assim por diante. Com a finalidade de rastrear a partícula durante esta viagem, convém entender: as coordenadas espaciais (x, y, z) , as coordenadas esféricas (θ, ϕ) da direção da partícula e também a energia E . Estas variáveis são suficientes para definir o estado α da partícula, onde

$$\alpha \equiv \alpha(x, y, z, \theta, \phi, E). \quad (4.2)$$

O sistema de coordenadas esféricas define a direção da partícula e está ilustrado na Figura 4.16, onde r é o raio da trajetória da partícula.

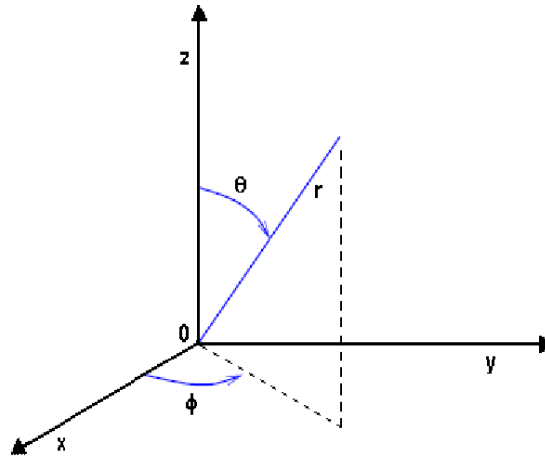


Figura 4.16 – Direção da partícula no espaço [Bell, 1970].

A trajetória de uma partícula de colisão para colisão pode ser construída como uma sucessão de estados $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_n$, onde o i -ésimo estado é:

$$\alpha_i \equiv \alpha_i(x_i, y_i, z_i, \theta_i, \phi_i, E_i). \quad (4.3)$$

Isto é, no i -ésimo estado a partícula tem as coordenadas espaciais do i -ésimo ponto de colisão e a energia e a direção após a i -ésima colisão. Com exceção do estado inicial, cada estado sucessivo é uma função somente do estado anterior e da lei de espalhamento obedecida pela

partícula no material de interesse. O estado α_0 traz as informações em que local do meio o nêutron foi originado e a sua energia de origem, ou seja, o estado α_0 fornece as condições iniciais do nêutron. Neste trabalho, estas condições iniciais são escolhidas por um modelo aleatório a partir da distribuição de probabilidade relevantes. Os novos valores das variáveis as quais determinam os próximos estados da partícula também são escolhidos aleatoriamente, com exceção da energia a qual não é puramente aleatória pois obedece a equação [Lamarsh, 1966]:

$$E_{i+1} = \left(\frac{A^2 + 1 + 2A \cos \theta}{(A + 1)^2} E_i \right), \quad (4.4)$$

onde A é a massa atômica do meio. Desta maneira, a história de vida individual pode ser construída.

No cálculo Monte Carlo não é necessário armazenar simultaneamente toda particularidade da história de vida de cada partícula estudada, usualmente tudo que é necessário é o último estado da partícula e sua tendência a seguir.

Vamos considerar uma partícula a qual tenha sofrido apenas a i -ésima colisão (um espalhamento) e estando por encontrar as coordenadas espaciais do próximo ponto de colisão. Se denotar por S o comprimento do caminho para o próximo ponto de colisão, a probabilidade da partícula viajar uma distância S sem sofrer nenhuma colisão é $e^{-\Sigma S}$. A probabilidade que uma partícula teria de sofrer uma interação no intervalo dS é $\Sigma_t ds$. Portanto, a probabilidade que uma partícula terá uma interação entre S e $S + dS$ é dada por:

$$\Sigma e^{-\Sigma S} dS, \quad (4.5)$$

onde Σ é a seção de choque de interação total da partícula. Portanto, estabelecemos um processo para escolha de um valor aleatório de S_i a partir da função probabilidade expressa pela equação (4.5). Uma vez que o valor S_i é determinado, as coordenadas do próximo ponto de colisão são imediatamente estabelecidas a partir das equações:

$$x_{i+1} = x_i + S_i(\sin \theta_i \cos \phi_i); \quad (4.6)$$

$$y_{i+1} = y_i + S_i(\sin \theta_i \sin \phi_i); \quad (4.7)$$

$$z_{i+1} = z_i + S_i \cos \theta_i. \quad (4.8)$$

Logo, o tipo de interação será determinado, novamente, a partir da função probabilidade apropriada e se o nêutron for espalhado o processo acima é repetido.

4.3 DESCRIÇÃO DO PROGRAMA “CONTINUOUS”

No programa “Continuous”, desenvolvido em linguagem C++ para este estudo, o nêutron pode se deslocar em qualquer direção e sentido. Durante sua história de vida o nêutron pode sofrer três tipos de interação com o meio, captura radiativa, espalhamento elástico ou fissão, podendo também escapar do meio, o que constituirá o termo de fugas. O número de nêutrons que sofrem uma dada interação ou que escapam do meio é estimado seguindo um grande número de histórias individuais de nêutrons, em princípio um número arbitrário, encontrado segundo algum critério de convergência.

Para uma simulação computacional realística do fluxo de nêutrons em um reator é necessário acompanhar a história de vida de um grande número de nêutrons, compatível com fluxos da ordem de $10^{13} \text{ cm}^{-1}\text{s}^{-1}$ ou ainda maiores. Isso acarretaria um tempo computacional relativamente grande, o que tornaria a simulação demorada, sem falar que o custo de processamento e de memória seriam elevados. Devido a esse fato, neste estudo dividiu-se o volume, onde as histórias dos nêutrons são acompanhadas, em várias partes, as quais foram chamadas de subvolumes.

A implementação do conceito de volume de controle permite simular computacionalmente o comportamento de uma população de nêutrons em um dado meio através do acompanhamento de histórias de vida de um número de nêutrons inferior ao necessário em simulações comuns. Uma peculiaridade do programa é que se pode definir um número elevado de nêutrons iniciais, por exemplo 10^6 , e simular vários cenários de criticalidade mantendo este número constante e variando o tamanho e portanto o número de subvolumes, ou seja o tamanho do volume de controle regula o regime da criticalidade na simulação. A descrição a seguir do programa tornará claro porque este procedimento não tem influência significativa no tempo de processamento computacional.

Todos os subvolumes são iguais, ou seja, todas as arestas têm o mesmo tamanho. Para definir o tamanho desses subvolumes, são realizados cortes em suas arestas x , y e z , cortes os quais são iguais, ou seja, se a aresta x for cortada em N vezes as arestas y e z também deverão sofrer o mesmo número de cortes, N . Toma-se cuidado aqui com o tamanho

das arestas dos subvolumes, as arestas não devem possuir um tamanho menor que o livre caminho médio dos nêutrons no meio. O número de volumes obtidos é dado pela relação $(N + 1)^3$.

Após definidos os subvolumes, denomina-se um desses subvolumes como sendo o volume de controle no dióxido de urânio e escolhe-se outro para ser o volume de controle na água. É a partir desses volumes de controle que o problema proposto passa a ser estudado. A Figura 4.17 traz apenas uma ilustração de um dado meio dividido em subvolumes e com um subvolume em destaque, o qual representa o volume de controle.

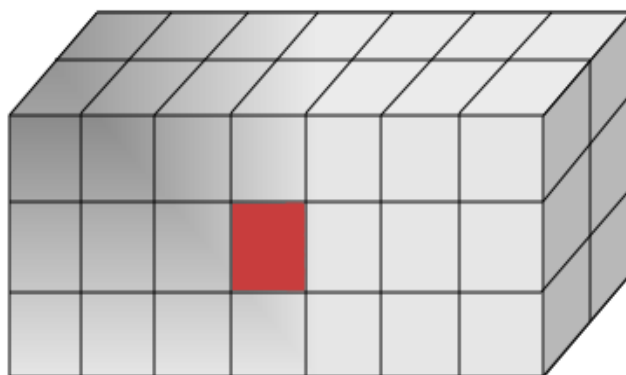


Figura 4.17 – Ilustração de um meio dividido em volumes e em destaque o volume de controle.

Os volumes de controle são escolhidos de maneira com que sejam os mais centrais possíveis. Todos os nêutrons nascem no volume de controle que se encontra no dióxido de urânio, sempre que houver espalhamento o nêutron espalhado retornará a esse volume de controle, se o espalhamento ocorrer no dióxido de urânio, ou retornarão ao volume de controle localizado na água, quando o espalhamento ocorrer na água. Este procedimento é semelhante ao uso de condições de contornos (pseudo-)periódicos com bifurcações entre os meios 1 e 2. A figura 4.18 traz de forma ilustrativa as bifurcações citadas anteriormente. Um nêutron espalhado a partir do dióxido de urânio tanto pode permanecer no dióxido como pode ser espalhado para a água. Essa mesma bifurcação vale para o caso onde o nêutron é espalhado a partir da água.

Depois de analisados os processos ocorridos nos volumes de controle, basta utilizar

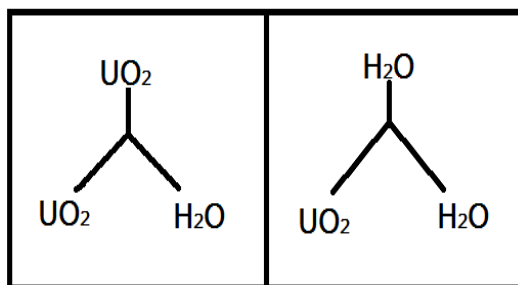


Figura 4.18 – Ilustração das bifurcações entre os meios.

uma ponderação para reescalar os processos que possivelmente ocorreriam nos outros subvolumes, levando em consideração que em princípio os processos físicos são os mesmos exceto pela probabilidade de fuga, que depende tanto da energia quanto da posição do volume em consideração. Essa ponderação é estimada com o uso de um programa auxiliar. Nesse programa auxiliar a ponderação é calculada através de uma relação entre o número de nêutrons que escaparam do meio a partir do subvolume analisado e o número de interações nesse subvolume.

Para começar a história do primeiro nêutron, é necessário determinar em que ponto do meio o nêutron foi gerado, ou seja, suas coordenadas x_0 , y_0 e z_0 , e qual a sua energia inicial E_0 . Usou-se o espectro de energia dos nêutrons provenientes da fissão do urânio-235 como espectro de energia inicial para os nêutrons gerados no programa. Logo após, se determina a distância que o nêutron percorrerá até sofre sua primeira interação. Essa distância percorrida leva a nome de passo, e é dada pela equação (3.5). Em seguida se determinam os ângulos θ e ϕ , os quais definem a direção que o nêutron irá se deslocar. Os ângulos são gerado aleatoriamente, pela rotina *rand* do C++. Estimados os ângulos e o tamanho do passo, se deve agora definir as coordenadas do ponto onde ocorrerá a interação, as novas coordenadas x , y e z , as quais são obtidas através das equações (4.6), (4.7) e (4.8).

Depois de definido o ponto onde ocorrerá a interação, deve-se testar se esse ponto não se encontra fora das fronteiras que limitam o meio. Caso o ponto se encontre fora destas fronteiras, o nêutron escapa do meio e a sua história termina naquele ponto e um novo nêutron é seguido, caso contrário, ocorrerá uma interação do nêutron com o meio. Nessa etapa do programa, a região do meio onde ocorrerá a interação também é definida, obedecendo a ponderação quando necessário.

O tipo de interação deve agora ser determinada, para isso se faz o uso das probabilidades de ocorrer cada uma das interações permitidas. A probabilidade de ocorrer certa interação é dada por

$$p_k = \frac{\Sigma_k}{\Sigma_t}, \quad (4.9)$$

onde o índice k indica o tipo de interação, por exemplo, se $i = a$ a equação (4.9) nos fornece a probabilidade do um nêutron ser absorvido, e assim por diante. A soma das probabilidades de todos os tipo de interação possíveis deve ser igual à unidade:

$$\sum_k p_k = 1. \quad (4.10)$$

Então, deve-se estabelecer uma faixa de valores para cada tipo de interação, a qual deve respeitar as relações de probabilidade das interações e o critério estabelecido pela equação (4.10). No caso da primeira região há três faixas de valores, uma para a captura radiativa, outra para o espalhamento e uma terceira faixa para a fissão, já na segunda região há apenas as duas primeiras faixas citadas anteriormente.

A natureza da interação é obtida comparando as faixas de valores de cada tipo de interação com um número ξ , selecionado aleatoriamente entre 0 e 1. Então, o tipo de interação que contém o número aleatório ξ na sua faixa de valores será a interação que o nêutron irá sofrer. Como estas faixas contêm números distintos apenas um tipo de interação será possível.

Se a interação selecionada for a de captura radiativa, então a história desse nêutron termina e outro nêutron é gerado e terá a sua história de vida acompanhada. Por outro lado, se a interação for de espalhamento elástico, então os ângulos os quais definem a direção que o nêutron será espalhado deve ser determinado por amostragem aleatória, um novo ponto de interação deve ser definido e também sua nova energia, por meio da equação (4.4) após o espalhamento. O processo descrito acima se repete até que este nêutron seja absorvido ou então escape do meio. Caso a interação selecionada for de fissão, a história do nêutron que produziu a fissão termina e novos nêutrons são gerados, dois ou três nêutrons, os quais também terão suas histórias de vidas seguidas.

Um nêutron pode sofrer m espalhamentos antes de ser absorvido, de produzir fissão

ou então escapar do meio. O número total de nêutrons gerados é arbitrário, mas a soma do número de nêutrons gerados no meio mais os nêutrons provenientes da fissão será sempre igual ao número de nêutrons absorvidos (incluindo os que produzem fissão) mais o número de nêutrons que escapam do meio. O programa é encerrado quando a história de vida de todos os nêutrons forem acompanhadas. A Figura 4.19 traz um fluxograma referente ao programa “Continuous”.

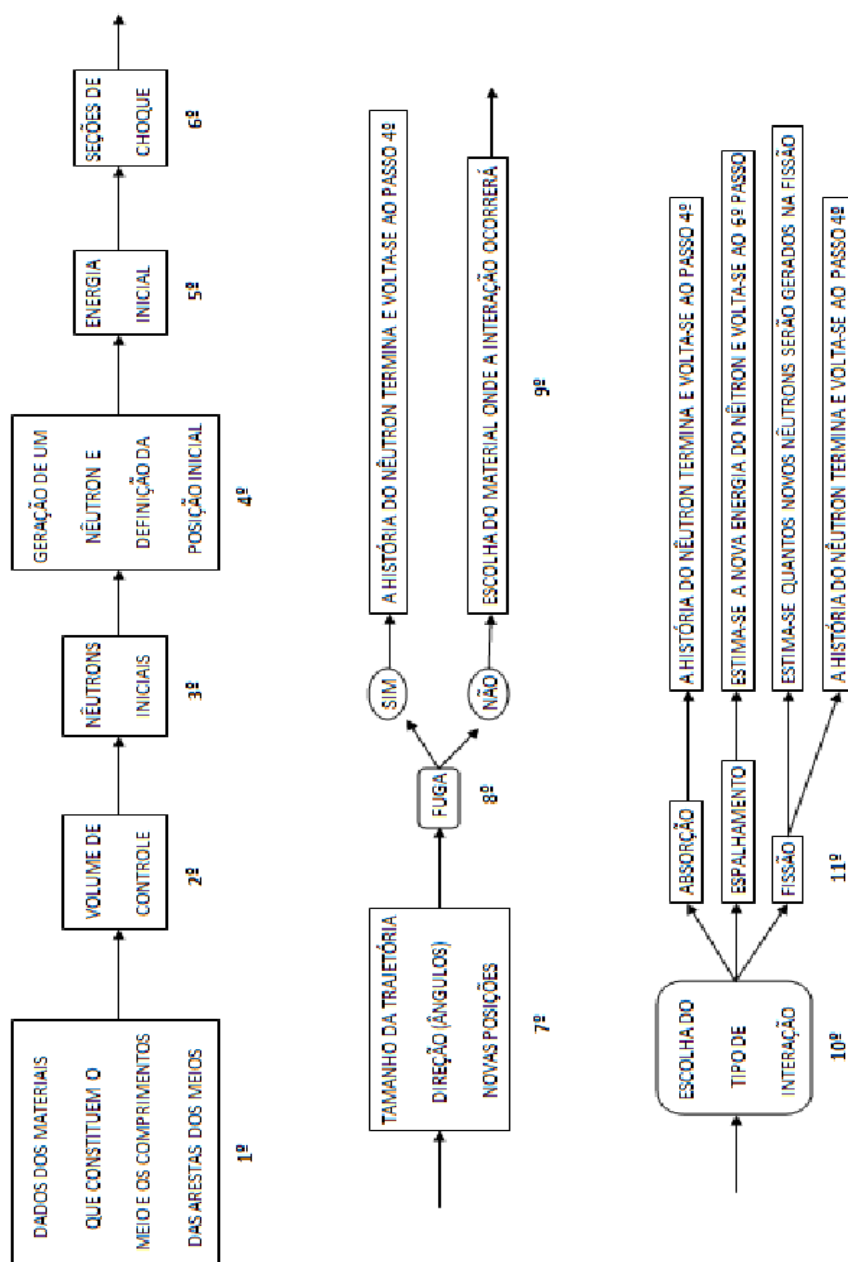


Figura 4.19 – Fluxograma do programa Continuous.

5. ANÁLISE DOS RESULTADOS

Primeiramente deve-se ressaltar que o trabalho desenvolvido deve ser considerado como um primeiro passo numa direção onde a dependência de energia de forma contínua e a dependência local da neutrônica são consideradas. Consequentemente neste estudo apenas uma seleção pequena de materiais que constituem o “núcleo de um reator” foi considerada, água e óxido de urânio, e adicionalmente usou-se uma geometria simples, especialmente com o intuito de validar o modelo. Isso permitirá futuramente realizar uma simulação mais realística, pois uma vez o método funcionando o resto é apenas mudanças na geometria do meio e nas condições impostas ao problema.

5.1 DENSIDADE DE NÊUTRONS DEPENDENTES DO TAMANHO DO VOLUME TOTAL E DE CONTROLE

Nesta seção será validada a densidade de nêutrons em volumes de controle de tamanho fixo e a sua dependência do tamanho do volume total. Tal estudo tem a finalidade de verificar os efeitos relacionados ao volume, isto é, as interações físicas com os relacionados à superfície, ou seja, as fugas. A influência da razão superfície-volume na densidade de nêutrons é apresentada na Figura 5.1. O aumento da densidade de nêutrons era previsto uma vez que aumentando as dimensões do meio se aproxima cada vez mais de uma situação de meio infinito, onde não há fugas. Cabe salientar que entre volumes de aresta de 20 cm e 30 cm a densidade muda de uma curva monótona decrescente para uma curva que tem um máximo num instante diferente do passo Monte Carlo zero $t_{MC} = 0$. O número de nêutrons é computado somando os nêutrons que nascem nos volumes de controle, incluindo aqui os nêutrons provenientes da fissão, com os nêutrons que foram espalhados para esses volumes. Conforme as dimensões do meio vão aumentando, a queda inicial observada na curva que descreve o número de nêutrons vai sendo menos acentuada. No caso onde o cubo possui arestas iguais a 30 cm essa queda na curva não é mais percebida, já no caso onde o cubo possui arestas iguais a 40 cm agora nota-se inicialmente um crescimento do número de nêutrons

e não mais uma queda. Isso deve-se ao fato que aumentando as dimensões do meio conseqüentemente diminuem as fugas e assim aumenta o número de espalhamentos, o número de capturas e também o número de fissões. Com o auxílio da Tabela 5.1 pode-se analisar com mais detalhes esses fatos, onde encontra-se, entre outras informações, o número de nêutrons que sofreram cada tipo de interação possível e o número de nêutrons que escaparam do meio. O tamanho do passo, citado na Tabela 5.1, corresponde ao número máximo de passos que os nêutrons realizaram no meio antes que sua história de vida terminasse. Este número representa uma escala proporcional à permanência dos nêutrons no volume.

O aumento do número de fissões contribui para a mudança na curva que descreve o número de nêutrons encontrada na Figura 5.1, a curva passa a ter inicialmente um crescimento ao invés de uma queda, isso é esperado devido ao aumento da criticalidade instantânea Monte Carlo naquele passo, levando a concluir que esta criticalidade varia ao longo dos passos. Nos quatro casos analisados realizaram-se nove cortes em cada aresta, o que resultou na divisão do meio em 1000 subvolumes para manter a razão volume de controle e volume total constante, e usou-se como o número de nêutrons iniciais o valor 10^6 .

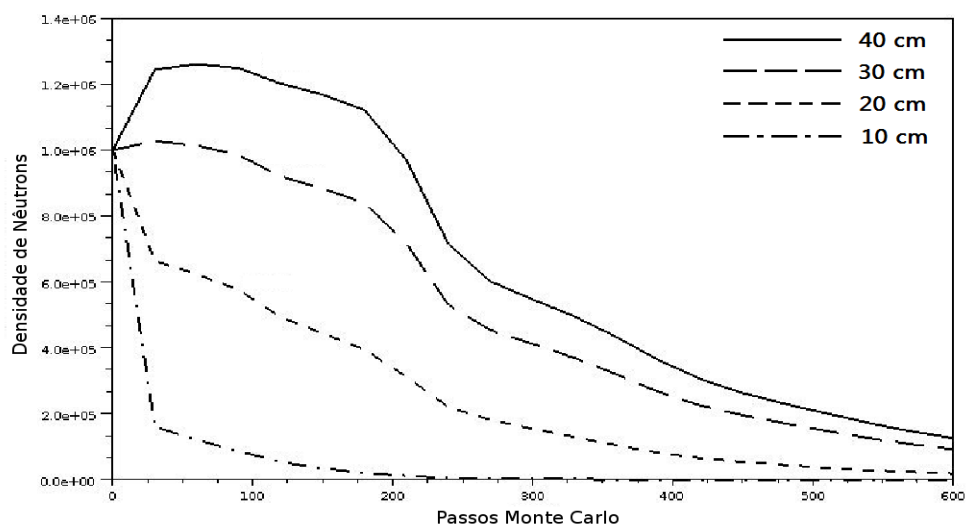


Figura 5.1 – Densidade de nêutrons ao longo do tempo em unidades de passos Monte Carlo no volume de controle, mantendo o número de subvolumes constante.

Note que, nos demais resultados, o tempo se refere a múltiplos de um passo Monte Carlo. A calibração em termos de unidades de tempo depende da arquitetura específica que

Tabela 5.1 – Alguns resultados do programa para meios cúbicos de diferentes tamanhos de arestas para um número fixo de subvolumes.

Comprimento das arestas (cm)	10	15	30	40
Espalhamento no dióxido	3819316	19023483	36859546	48307248
Captura no dióxido	79351	444327	689743	724477
Fissão no dióxido	91632	486650	871259	1046330
Espalhamento na água	16368573	133174357	286869800	373129600
Captura na água	16817	270032	708440	1016653
Fugas do meio	1033292	870623	500684	227402
Total de Histórias seguidas	1227527	2210087	3166082	3601492
Número máximo de passos	689	1765	2831	2504

contém os meios diferentes e é realizada identificando o ciclo de vida de nêutrons. Com a finalidade de verificar a densidade de nêutrons pelo tamanho dos volumes de controle realizou-se um estudo onde o tamanho das arestas que definem o volume total foi mantido sempre o mesmo, variando agora o número de cortes feito em cada umas das arestas, ou seja, variando os volumes de controle. Um meio onde se realizou cinco cortes nas arestas corresponde a um meio constituído de 216 subvolumes, já onde o número de cortes feito em cada aresta do meio é nove significa que o meio passou a ser constituído de 1000 subvolumes, logo um meio que tem suas arestas cortadas em 15 posições será constituído de 3375 subvolumes. Cuidou-se em todos os casos para que os tamanhos das arestas dos volumes de controle fossem orientados na ordem de grandeza do livre caminho médio dos nêutrons no meio. Nos três casos analisados o tamanho das arestas que definem o meio cúbico á igual 30 cm e o número de nêutrons iniciais é 10^6 .

Os resultados numéricos deste estudo encontram-se na Figura 5.2 e na Tabela 5.2, onde pode-se observar, que diferente do estudo realizado anteriormente, não se tem uma mudança muito acentuada na curva que descreve o número de nêutrons nos volumes de controle, o que nota-se de um caso para o outro é uma diferença na intensidade de decaimento dessa curva ao longo dos passos Monte Carlo, onde a curva que decai mais suavemente é a que descreve o comportamento do número de nêutrons nos volumes de controle de arestas

menores. Isto é exatamente o que se espera lembrando que os 10^6 nêutrons iniciais referem ao volume de controle, ou seja, o volume de controle regula a densidade inicial de nêutrons. Durante os estudos realizados verificou-se que se for aumentando o tamanho das arestas que definem o meio, em um certo momento o tamanho dos volumes de controle poderá interferir na criticalidade do problema, ou seja, pode-se simular criticalidades diferentes apenas variando as dimensões desses volumes.

Analisando a Tabela 5.2 verifica-se que diminuir as dimensões do volume de controle não evita as fugas do meio, apenas aumenta o número de interações sofridas, o número de nêutrons gerados e também aumenta o tamanho máximo do passo, porém, o número de histórias por número máximo de passos decresce levemente com aumento do número de subvolumes. A vantagem de usar volumes de controle menores é devido ao fato de se obter uma concentração maior de nêutrons, proporcionando dessa forma a possibilidade de acompanhar um número reduzido de histórias de vida de nêutrons e mesmo assim resultar em uma aproximação com flutuações aceitáveis para o comportamento médio deles no meio, comportamento o qual é reescalado para todos os subvolumes no meio via ponderação que corrige a densidade pela probabilidade local de fuga dependendo da posição do subvolume no volume total.

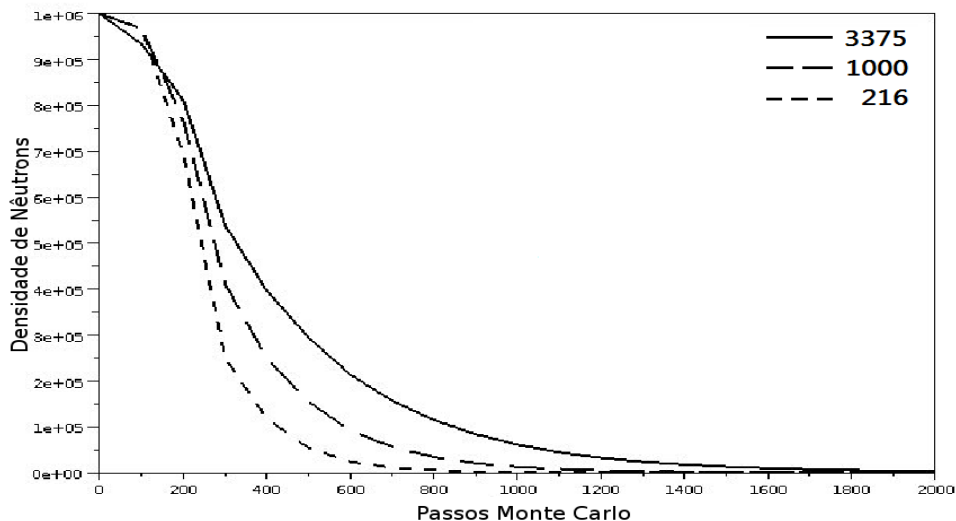


Figura 5.2 – Densidade de nêutrons ao longo do tempo em unidades de passos Monte Carlo no volume de controle, variando o número de subvolumes.

Tabela 5.2 – Alguns resultados do programa para meios cúbicos de arestas iguais a 30 cm para tamanhos de subvolumes diferentes.

Número de subvolumes	216	1000	3375
Espalhamento no dióxido	32742428	36835684	50116566
Captura no dióxido	394701	689291	1287235
Fissão no dióxido	634170	869980	1334654
Espalhamento na água	224705759	286491610	370017327
Captura na água	652182	709229	721162
Fugas do meio	501220	550983	610975
Total de Histórias seguidas	2576307	3163913	4317280
Número máximo de passos	1996	2654	3945

5.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA POSIÇÃO NA DENSIDADE DE NÊUTRONS

Enquanto os ensaios anteriores validaram os parâmetros para controlar a simulação, nesta seção serão apresentados resultados da simulação referente aos efeitos dos meios na densidade de nêutrons. Como passo inicial será analisada a densidade de nêutrons. Em trabalhos futuros, o programa permitirá avaliar outras grandezas, como a densidade vezes a raiz da energia cinética, ou seja, o fluxo escalar de nêutrons, ou o fluxo multiplicado pela seção de choque média que corresponde à taxa de reação, entre outras. Escolheu-se a densidade de nêutrons e a densidade de interações porque esses são mais intuitivos em função da validação da simulação. As camadas são definidas fixando uma faixa de valores no eixo y do meio, como demonstrado na Figura 5.3. A ordenada nas Figuras 5.4 e 5.8 fornece o número de interações dos nêutrons que se encontram na camada analisada, tanto os nêutrons que nascem quanto os que são espalhados para essa camada, e que sofrerão algum tipo de interação nela. Não estão sendo computadas aqui as fugas do meio, ou seja, a ordenada nos fornece a frequência de interação por posição. Todos os nêutrons partem inicialmente no dióxido de urânio.

A Figura 5.4 ilustra o comportamento dos nêutrons em um cubo composto de 16 camadas e com arestas que medem 10 cm, onde a camada analisada é a de número 8 (a numeração começa de baixo para cima). Nota-se por meio dessa figura que a frequência de

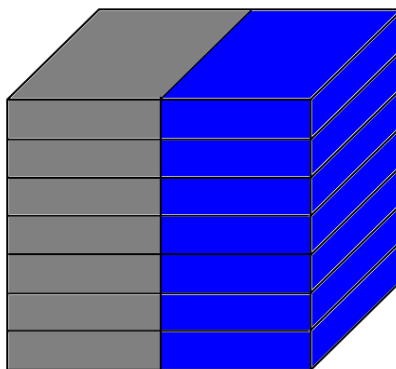


Figura 5.3 – Desenho ilustrativo de um meio dividido em sete camadas.

interação por posição é maior no dióxido de urânio do que na água e também a frequência de fuga, apresentada na Figura 5.6. Esses resultados estão dentro do esperado, uma vez que todos os nêutrons nasceram no dióxido e só surgiram na água quando foram espalhados para ela. Com as arestas do cubo medindo 10 cm, grande parte dos nêutrons surgem na água escapam do meio cúbico sem sofrer muitos espalhamentos, o que resulta em uma baixa frequência e interação na água.

Comparando os resultados apresentados nas Figuras 5.4, 5.6, 5.8 e 5.10 obtidos pelo programa com o uso dos volumes de controle e sem o uso volumes de controle, respectivamente, observa-se que essas figuras são semelhantes, levando a concluir que o uso dos volumes de controle nos fornece resultados fiéis em um tempo de processamento muito menor, uma vez que o número de histórias de nêutrons a serem acompanhadas é inferior ao número necessário no caso do programa que não usa a técnica de volumes reguláveis. Usou-se 10^6 como número inicial de nêutrons a serem gerados nos casos onde não havia volumes de controle e 10^4 nos casos onde os volume de controle foram usados. Mesmo assim, observa-se uma densidade de nêutrons muito maior nos casos onde usaram os volumes de controle do que nos casos onde eles não foram usados. Apenas como um pertinente comparativo, obteve-se um tempo de CPU igual a 600 s para um dado caso onde não foram usados os volumes de controle, enquanto que para um caso onde esses volumes foram usados, o tempo de CPU caiu para 81 s.

Por meio das isolinhas que se encontram nas Figuras 5.5, 5.7, 5.9 e 5.11, pode-se verificar que a concentração de interações é maior no centro do cubo, enquanto a concentração de nêutros que escapam do meio é maior nas periferias da metade composta de dióxido, o

que era esperado, pois os nêutrons que se encontram em elementos mais periféricos tem a probabilidade maior de escaparem do meio do que os nêutrons que se encontram em elementos mais centrais. Já na água uma maior intensidade de fugas de nêutrons é observada nos subvolumes centrais, uma vez que muitos nêutrons escapam do meio sem sofrer muitas interações, pois o livre caminho médio na água é maior que no dióxido de urânio.

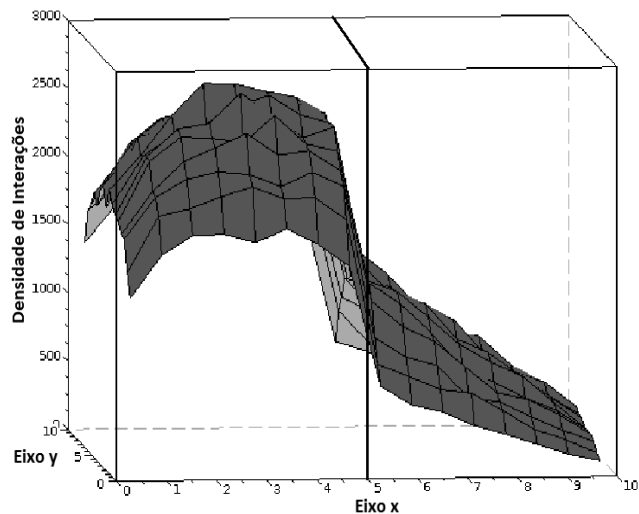


Figura 5.4 – Densidade de interações na camada 8. As arestas tem 10cm de comprimento e a espessura da camada é $10\text{cm}/16$, com o uso dos volumes de controle.

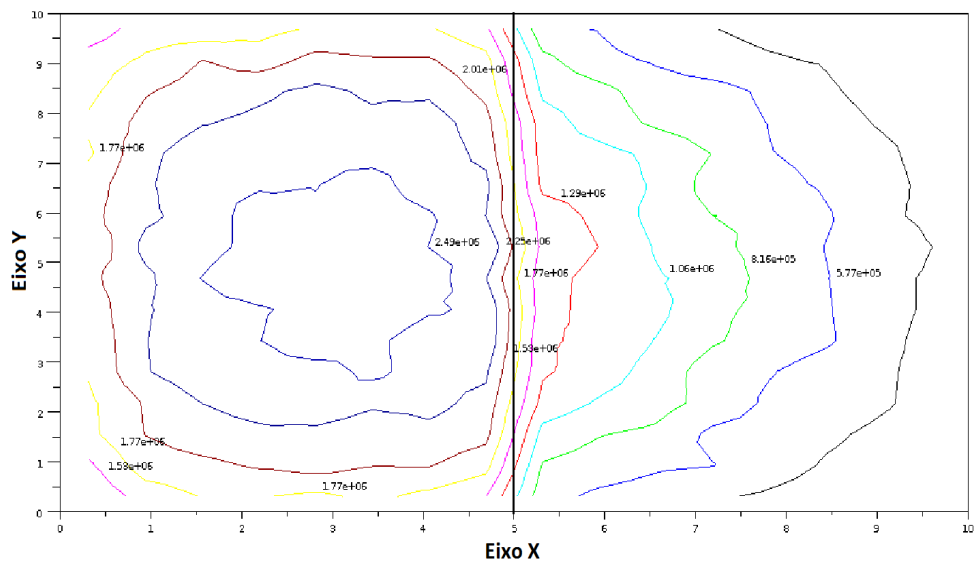


Figura 5.5 – Isolinhas da densidade de interações para a camada 8 no centro do cubo.

Arestas tem 10 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.

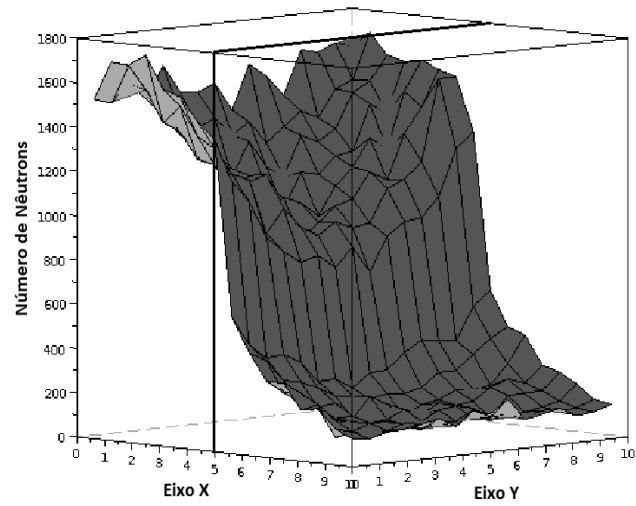


Figura 5.6 – Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento onde os volumes de controle são usados.

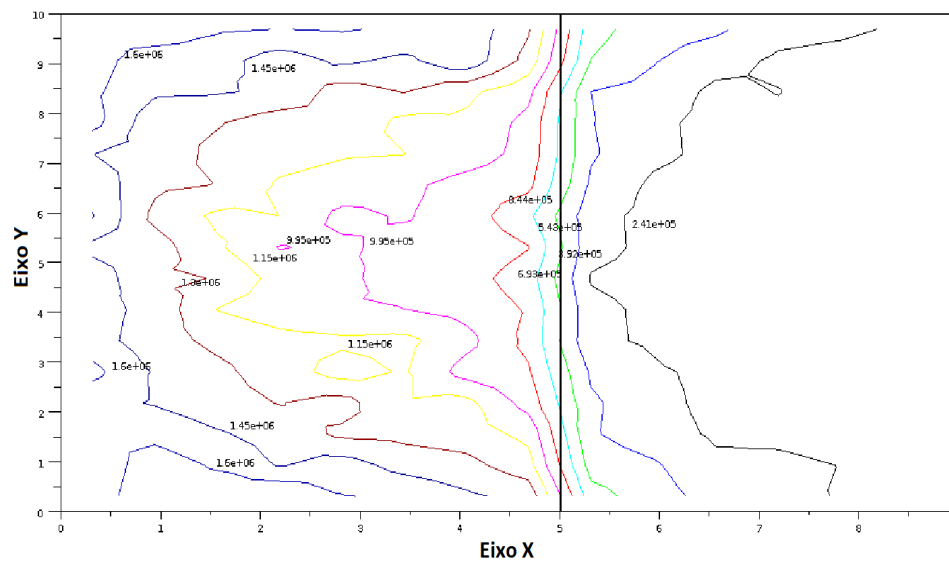


Figura 5.7 – Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento, volumes de controle são usados.

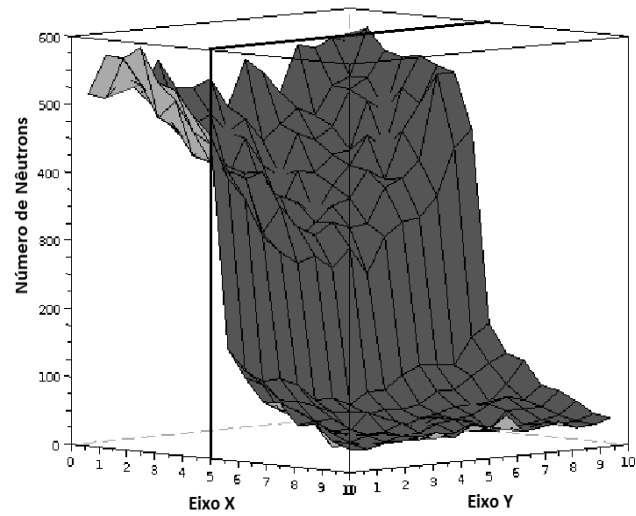


Figura 5.10 – Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.

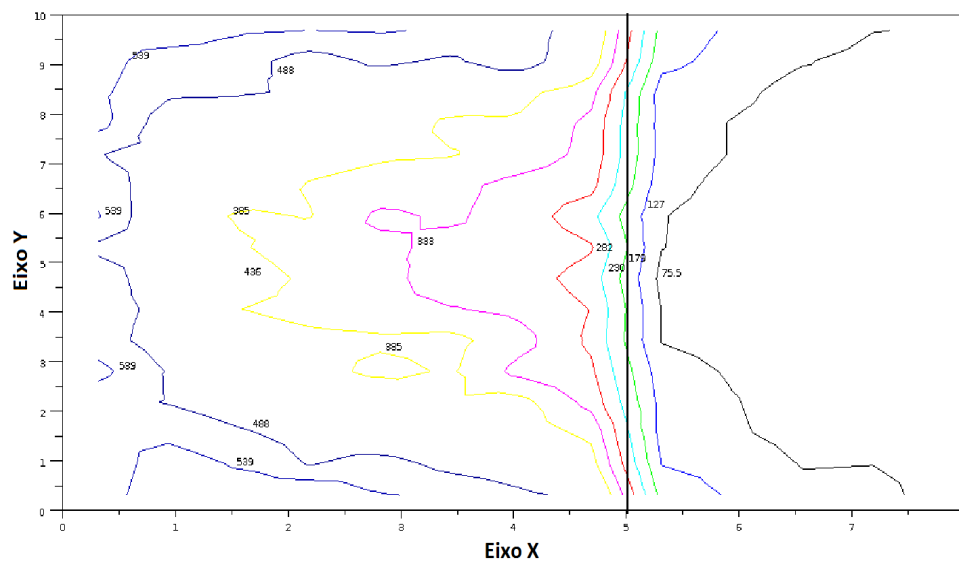


Figura 5.11 – Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 10 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.

No caso onde as arestas do cubo medem 30 cm, onde o número de camadas continua sendo 16, observa-se por meio das Figuras 5.12 e 5.13 uma frequência de interação maior na água e não mais no dióxido, como visto no caso descrito anteriormente. Esse acentuado aumento da frequência de interação na água deve-se ao fato dos nêutrons sofrerem mais espalhamentos antes de sofrerem um evento terminal, pois o tamanho do passo aqui é muito maior que no caso anterior. O tamanho do passo nos fornece o número de interações que o nêutron sofreu ao longo de sua história de vida. O papel da água é termalizar os nêutrons por meio de espalhamentos, logo os resultados obtidos são consistentes.

Já nas Figuras 5.14 e 5.15, nota-se que a maior parte dos nêutrons continuam escapando do meio através do dióxido de urânio, o que é um resultado consistente, pois aumentou acentuadamente o número de espalhamentos que os nêutrons sofrem antes de serem capturados na água ou de escaparem do meio, e não o número de nêutrons espalhados do urânio para a água. Logo continua sendo maior o número de nêutrons que surgem no dióxido do que na água, e assim, as fugas continuam sendo mais intensas no dióxido, pois os nêutrons iniciais tem uma energia maior e conseqüentemente um maior livre caminho médio, aumentando dessa forma a possibilidade de fuga do meio. Lembrando que todos os nêutrons nascem no dióxido de urânio, apenas irão surgir na água se forem espalhados para a mesma.

Analisando as Figuras 5.12, 5.20 e 5.28 nota-se que o pico da frequência de interações na água vai diminuindo conforme a camada vai se aproximando mais das superfícies que limitam do meio. Como os nêutrons estão em elementos mais periféricos, eles escapam mais facilmente do meio, diminuindo assim o número de espalhamentos sofridos pelos nêutrons antes da fuga. Observa-se que tanto na Figura 5.28 quanto na figura 5.30 que o comportamento dos nêutrons vai se aproximando ao caso onde as arestas do meio eram menores, 10 cm.

Por meio das Figuras 5.22, 5.23, 5.30 e 5.31, verifica-se que o número de nêutrons que escapam do meio através do dióxido de urânio continua sendo muito maior do que o número de nêutrons que escapam através da água. Mais uma vez observa-se uma boa semelhança entre os os resultados obtidos pelo programa usando os volumes de controle e os resultados obtidos sem o uso desses volumes, resultados os quais se encontram nas Figuras 5.12, 5.14, 5.16, 5.18, 5.20, 5.22, 5.24, 5.26, 5.28, 5.30, 5.32 e 5.34.

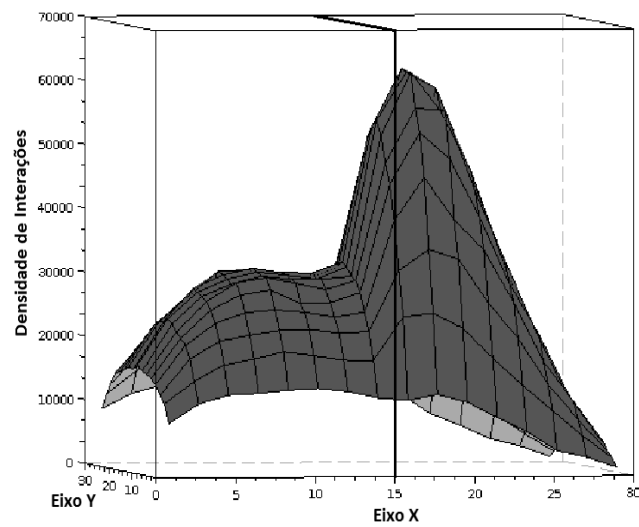


Figura 5.12 – Densidade de interações na camada 8. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, com o uso dos volumes de controle.

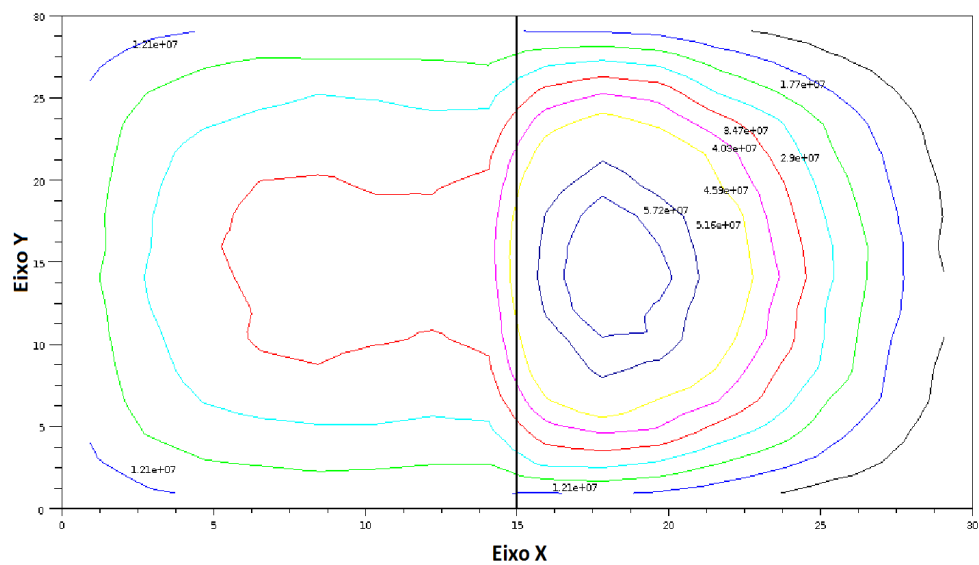


Figura 5.13 – Isolinhas da densidade de interações para a camada 8 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.

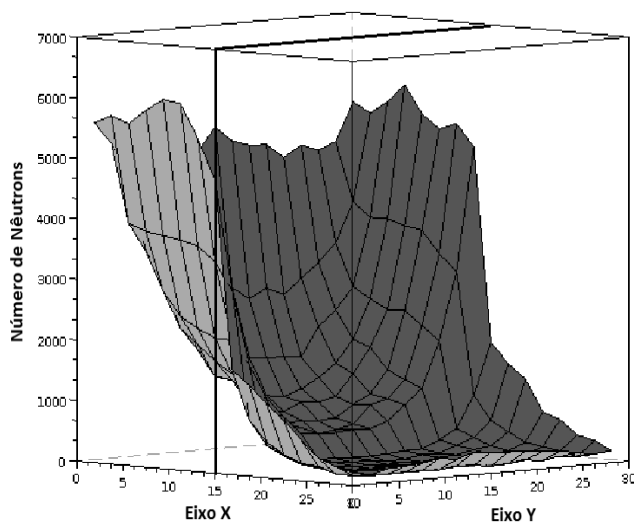


Figura 5.14 – Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle são usados.

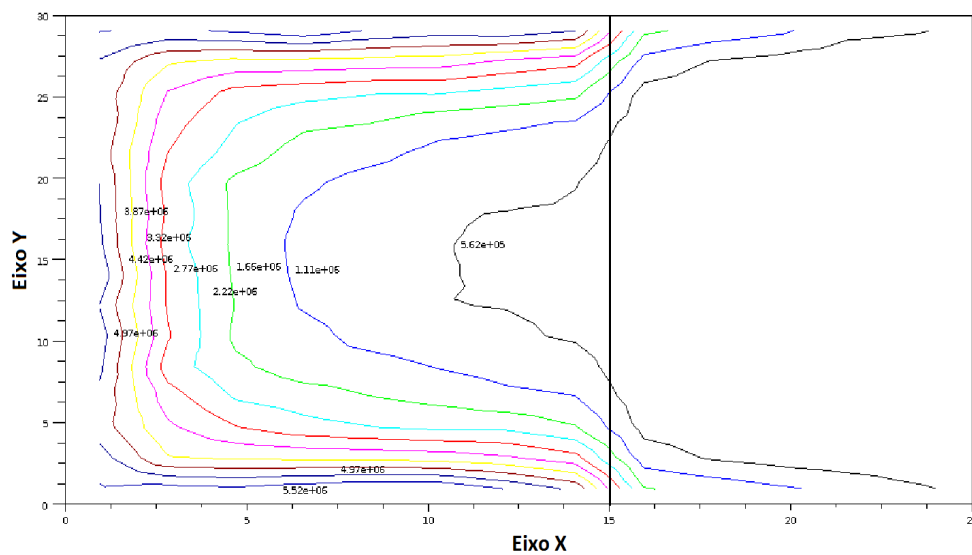


Figura 5.15 – Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle são usados.

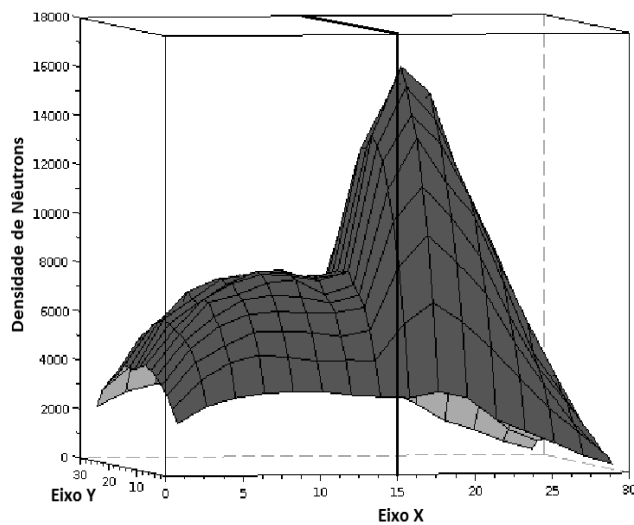


Figura 5.16 – Densidade de interações na camada 8. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, sem o uso dos volumes de controle.

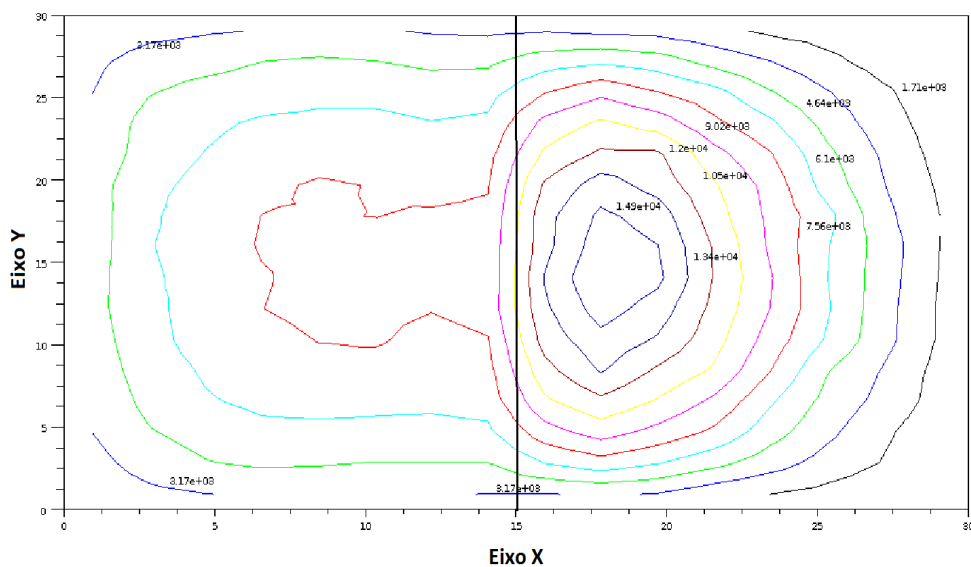


Figura 5.17 – Isolinhas da densidade de interações para a camada 8 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento, sem a utilização dos volumes de controles.

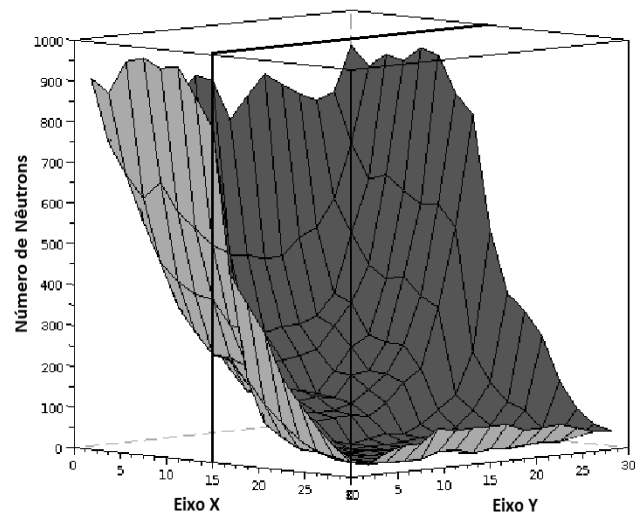


Figura 5.18 – Número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.

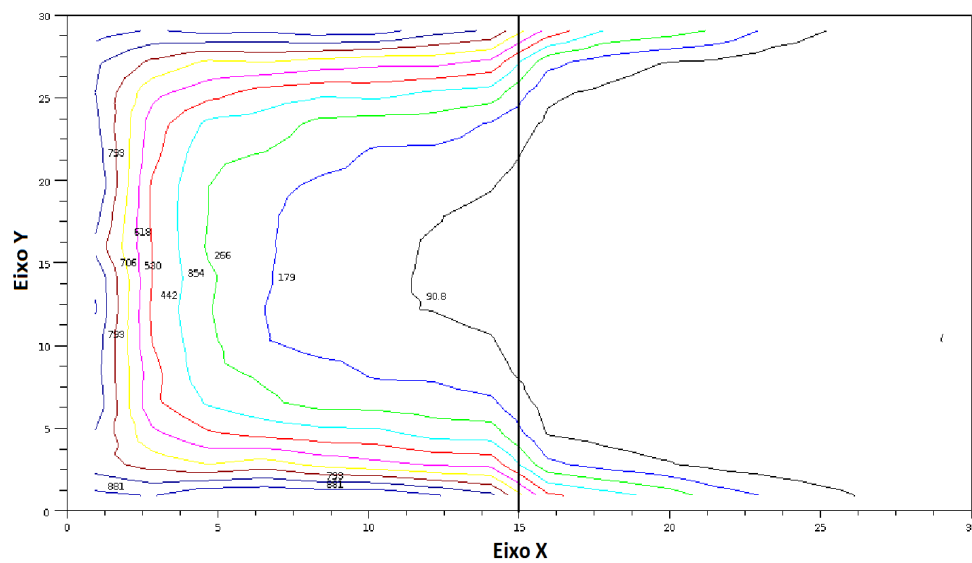


Figura 5.19 – Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 8 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.

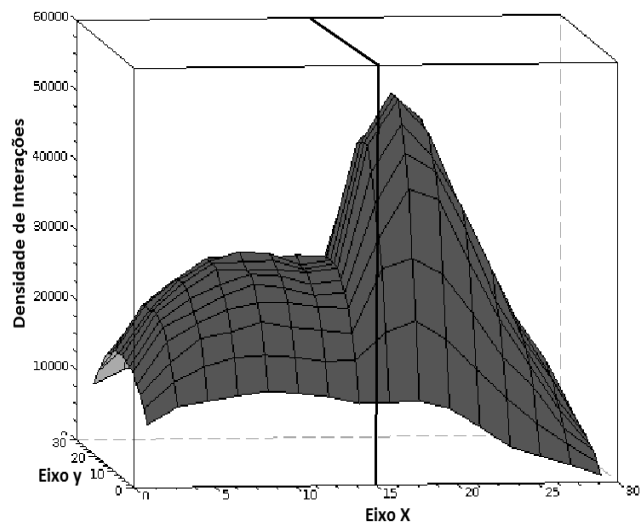


Figura 5.20 – Densidade de interações na camada 12. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, com o uso dos volumes de controle.

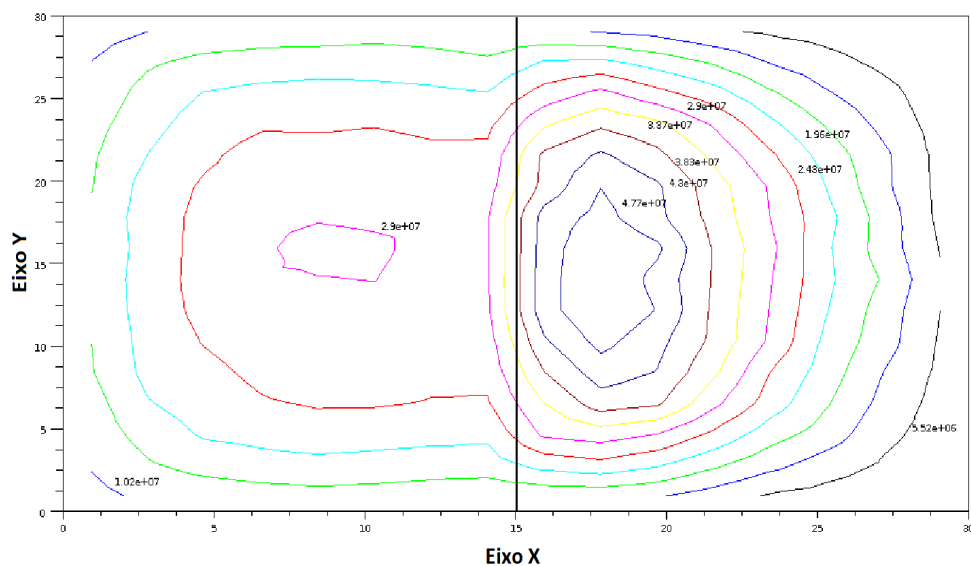


Figura 5.21 – Isolinhas da densidade de interações para a camada 12 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.

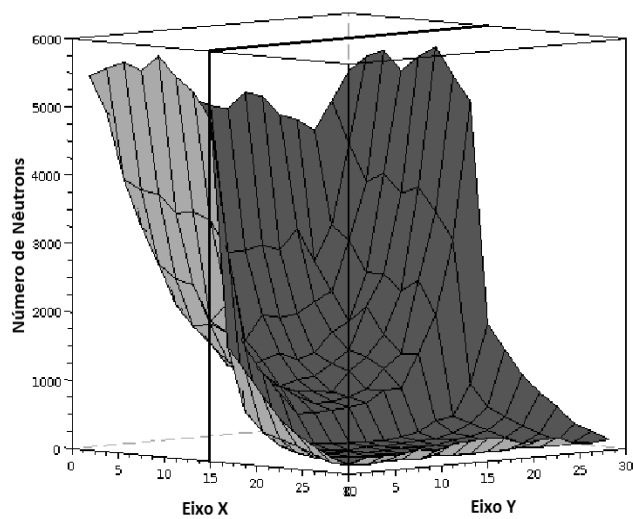


Figura 5.22 – Número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle são usados.

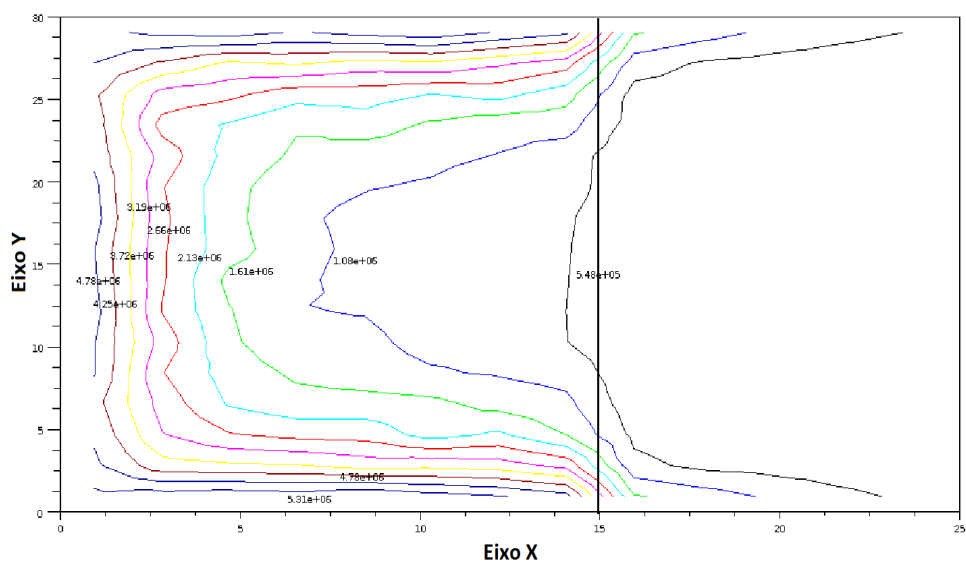


Figura 5.23 – Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle são usados.

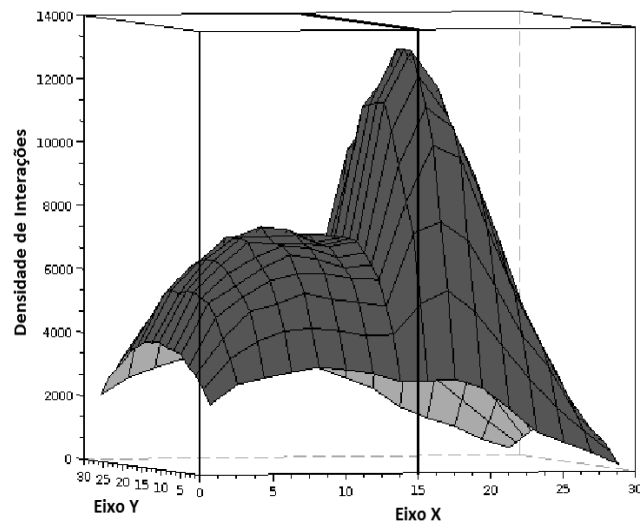


Figura 5.24 – Densidade de interações na camada 12. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, sem o uso dos volumes de controle..

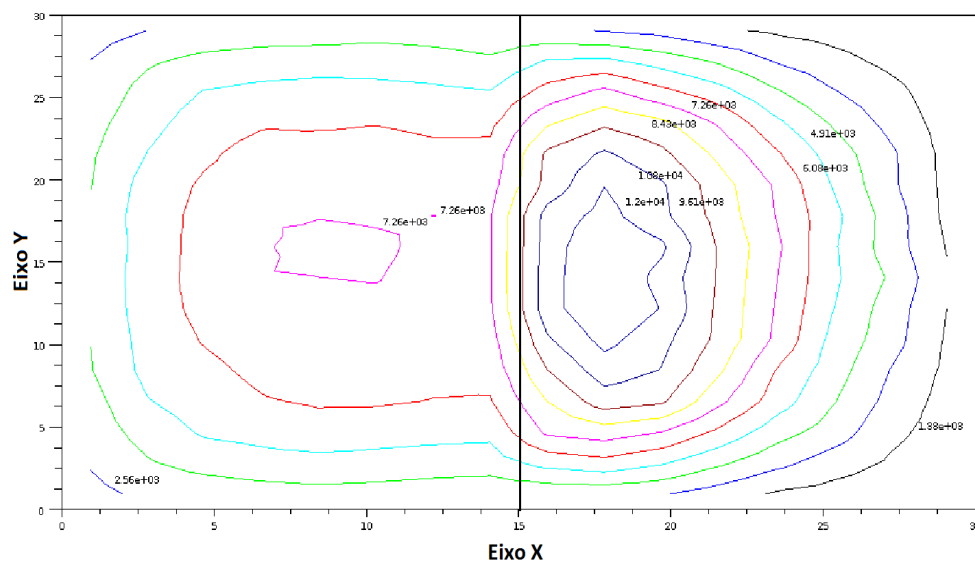


Figura 5.25 – Isolinhas da densidade de interações para a camada 12 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento, sem a utilização dos volumes de controles.

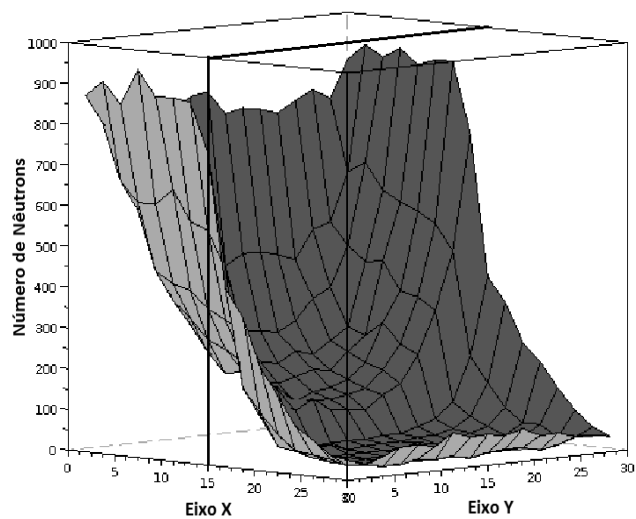


Figura 5.26 – Número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.

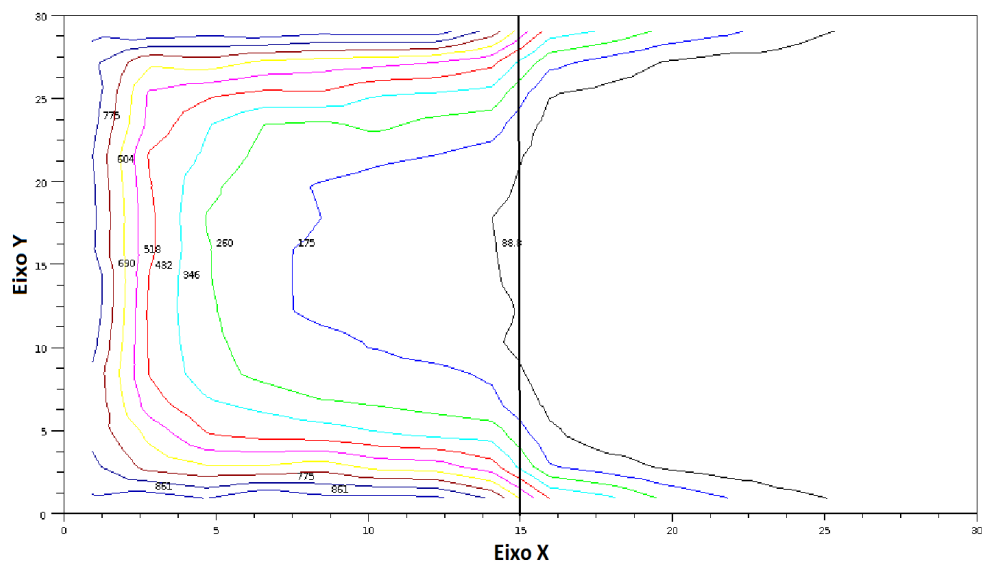


Figura 5.27 – Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 12 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.

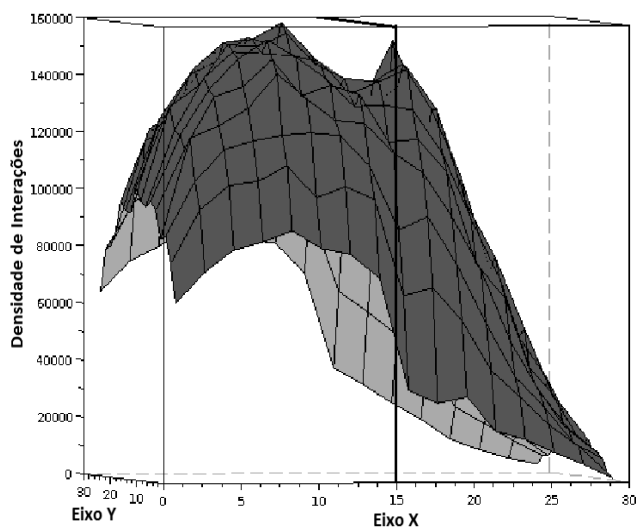


Figura 5.28 – Densidade de interações na camada 16. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, com o uso dos volumes de controle.

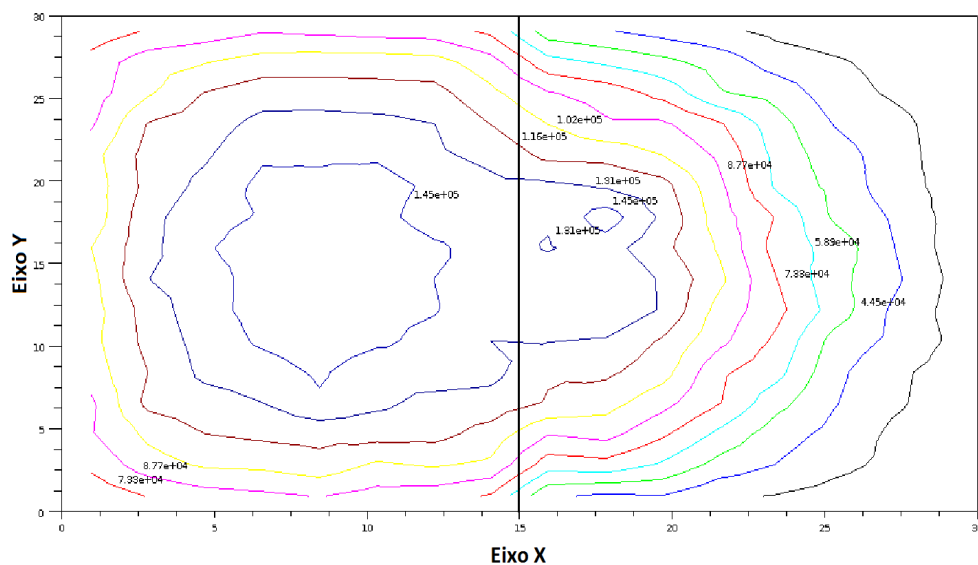


Figura 5.29 – Isolinhas da densidade de interações para a camada 16 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento e volumes de controles são utilizados.

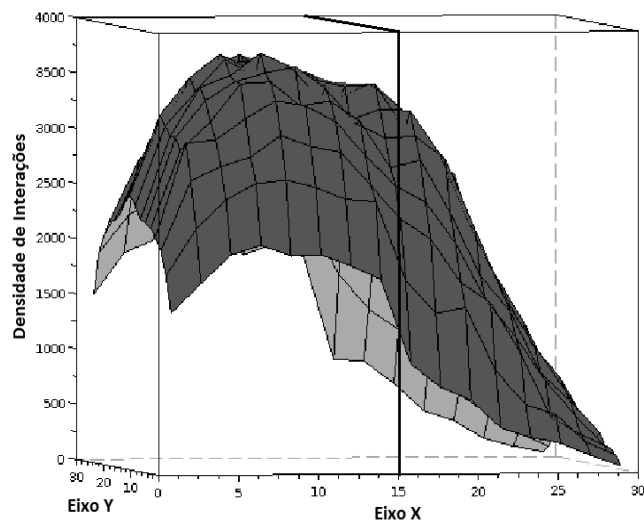


Figura 5.32 – Densidade de interações na camada 12. As arestas tem 30 cm de comprimento e a espessura da camada é $30\text{cm}/16$, sem o uso dos volumes de controle.

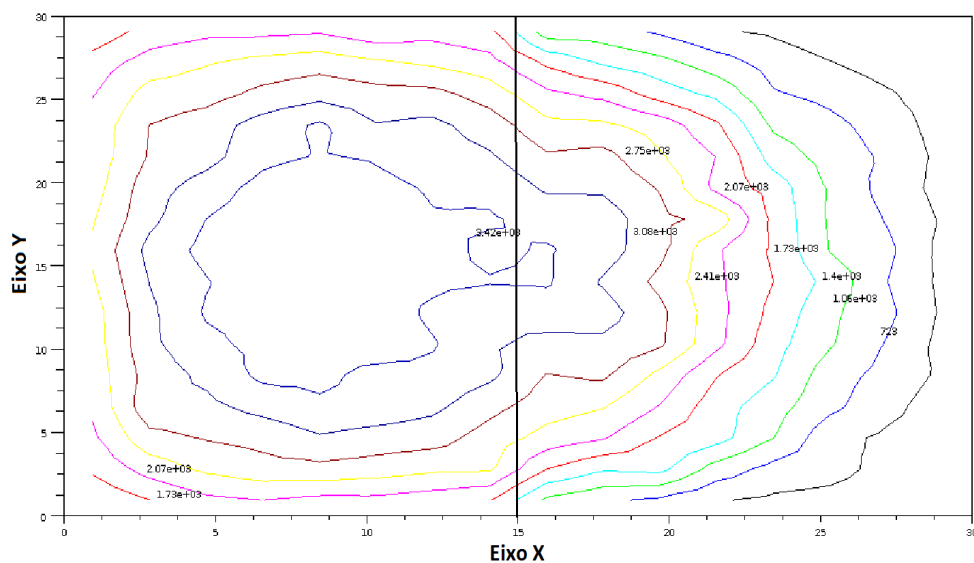


Figura 5.33 – Isolinhas da densidade de interações para a camada 16 no centro do cubo. Arestas tem 30 cm de comprimento, sem a utilização dos volumes de controles.

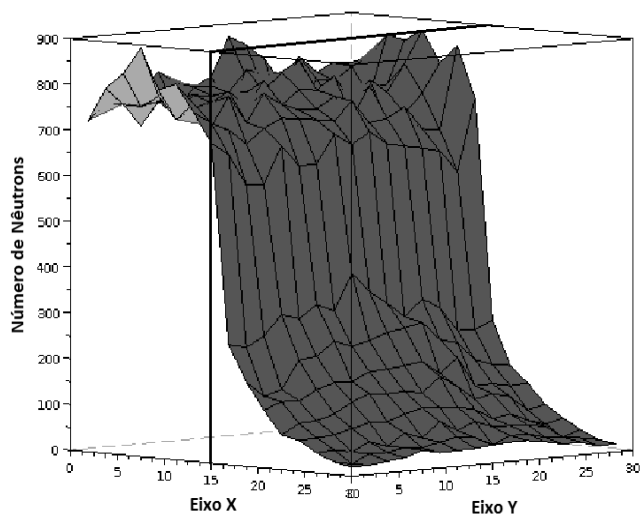


Figura 5.34 – Número de nêutrons por volume da camada 16 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento onde os volumes de controle não são usados.

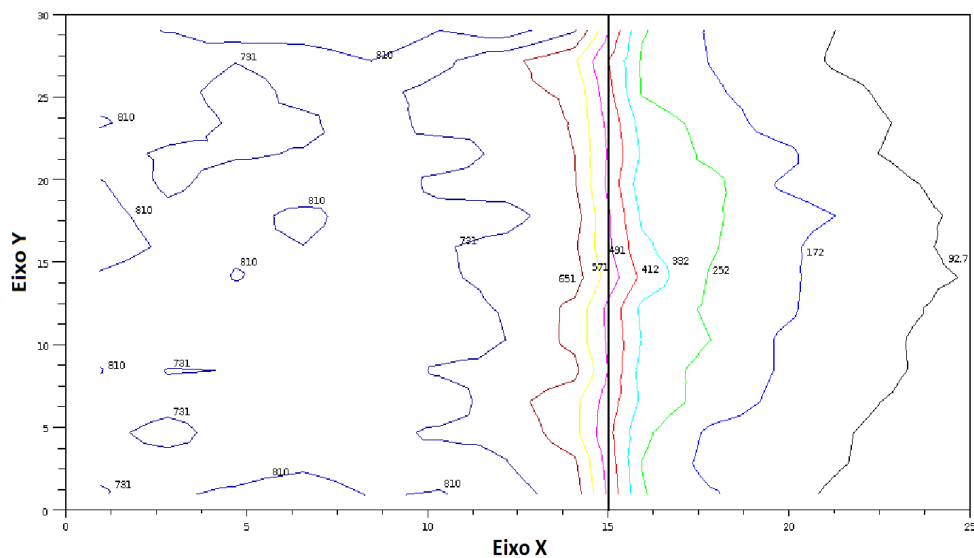


Figura 5.35 – Isolinhas do número de nêutrons por volume da camada 16 que escaparam para fora do meio. Arestas tem 30 cm de comprimento, volumes de controle não são usados.

5.3 O FATOR DE MULTIPLICAÇÃO INSTANTÂNEO ESPECTRAL MONTE CARLO

Na seção anterior observou-se a influência da geometria na densidade de interações e as fugas de nêutrons. Nesta seção será analisado o aspecto espectral no desenvolvimento da população de nêutrons e a sua dependência temporal, aqui em unidades de passos Monte Carlo. Como grandeza principal da análise é introduzido um fator de multiplicação da simulação que daqui por diante será chamado de fator de multiplicação instantâneo espectral Monte Carlo, ou de forma abreviada fator de multiplicação Monte Carlo. Enquanto nesta fase do trabalho apenas a dependência espectral e a dependência do tamanho dos volumes de controle são investigadas, existe a possibilidade e necessidade de estender o procedimento também a uma análise local, ou seja, dependente da posição. Para esta finalidade usou-se um cubo de arestas iguais a 80 cm e com 10^6 subvolumes, tendo 10^4 como número de nêutrons iniciais. O passo Monte Carlo é uma grandeza que pode estar relacionada com uma escala de tempo após calibração. Definida essa escala de tempo pode-se obter o fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , quando a simulação atinge um estado estacionário e o número de passos entre as gerações sucessivas é contado. Uma escala de tempo natural é o tempo de geração de nêutrons, ou seja, o tempo necessário para nêutrons de uma geração produzir fissões que produzirão a próxima geração de nêutrons [Cullen, 2003]. Este intervalo de tempo é determinado por três intervalos de tempo, o tempo que leva um nêutron rápido para diminuir à energia térmica, o tempo de sobrevivência de nêutrons térmicos antes da captura radiativa no combustível, e o tempo para um núcleo físsil emitir um nêutron rápido depois da absorção do nêutron. Numa forma simplificada pode-se verificar este comportamento. Caso que cada um dos 10^4 nêutrons iniciais começa com o tempo Monte Carlo $t_{MC}^{(0)} = 0$, então o ensemble dos nêutrons que surgem por reações de fissão num instante $t_{MC} > 0$ produzem um pico na sequência temporal. Evidentemente estas marcas temporárias se dissipam de uma geração para outra. Deve-se lembrar aqui que não foram incluídos os precursores oriundos dos decaimentos dos produtos de fissão, que mudaria o procedimento da calibração temporal.

Os picos encontrados na Figura 5.36 identificam as gerações, esses picos vão sendo atenuados ao longo dos passos devido à termalização dos nêutrons quando interagem na água. A série de passos que os nêutrons da fissão passam para reduzir sua energia à energias térmicas e serem absorvidos no reator para posteriormente produzir fissão é referido como o

ciclo de vida de nêutrons.

Na Figura 5.37 encontra-se a distribuição da energia dos nêutrons para uma sequência de instantes passos Monte Carlo. Observa-se uma mudança mais pronunciada na região de energias mais altas. Os nêutrons mais energéticos são os originais, provenientes da fissão, o que justifica essa mudança mais acentuada no espectro de energia dos nêutrons na faixa de energias mais elevadas. Há muito mais nêutrons sendo espalhados, o que causa uma queda na energia, do que nêutrons originais nesta faixa, ou seja, o espectro de nêutrons sofre uma alteração significativa ao longo do tempo. A Figura 5.38 traz a mudança no fator de multiplicação espectral com os passos Monte Carlo. O que se observa também aqui é a dependência significativa de energia entre a densidade espectral de nêutrons para um dado instante passo Monte Carlo em comparação a sua densidade do passo anterior.

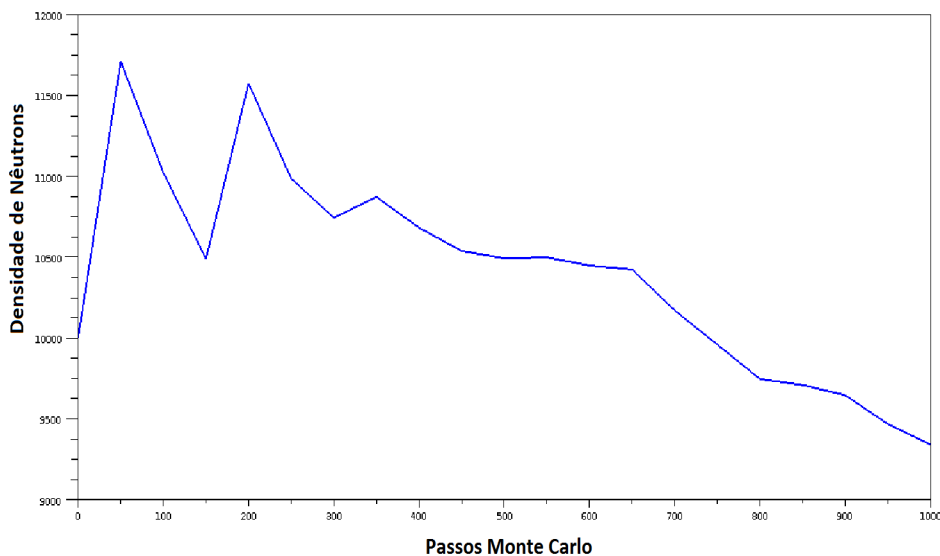


Figura 5.36 – Identificação do ciclo de nêutrons em passos Monte Carlo.

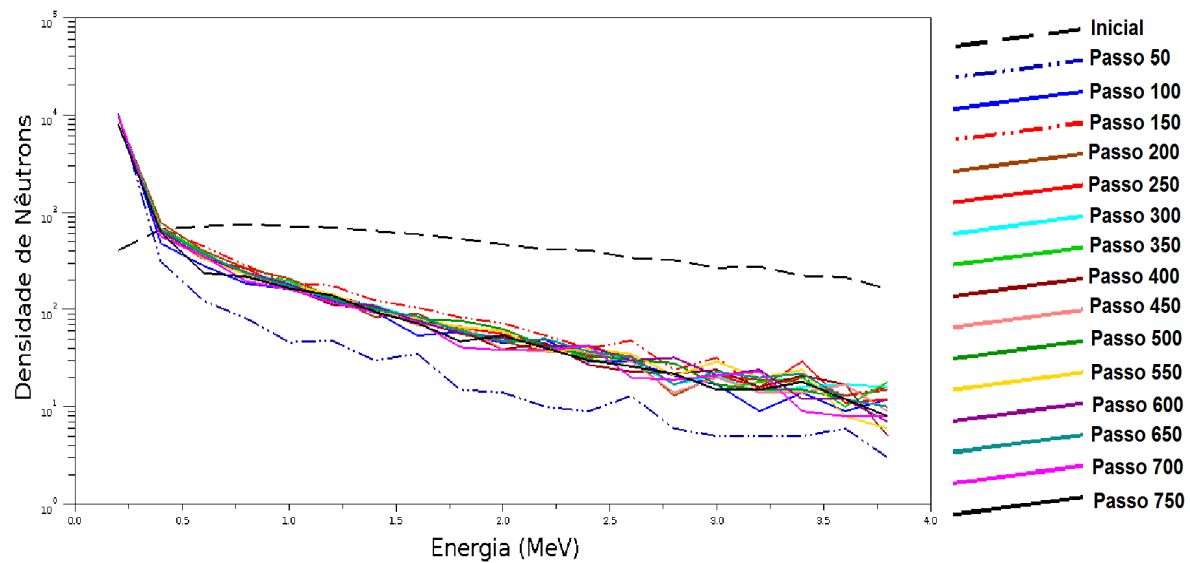


Figura 5.37 – Distribuição da energia ao longo dos passos.

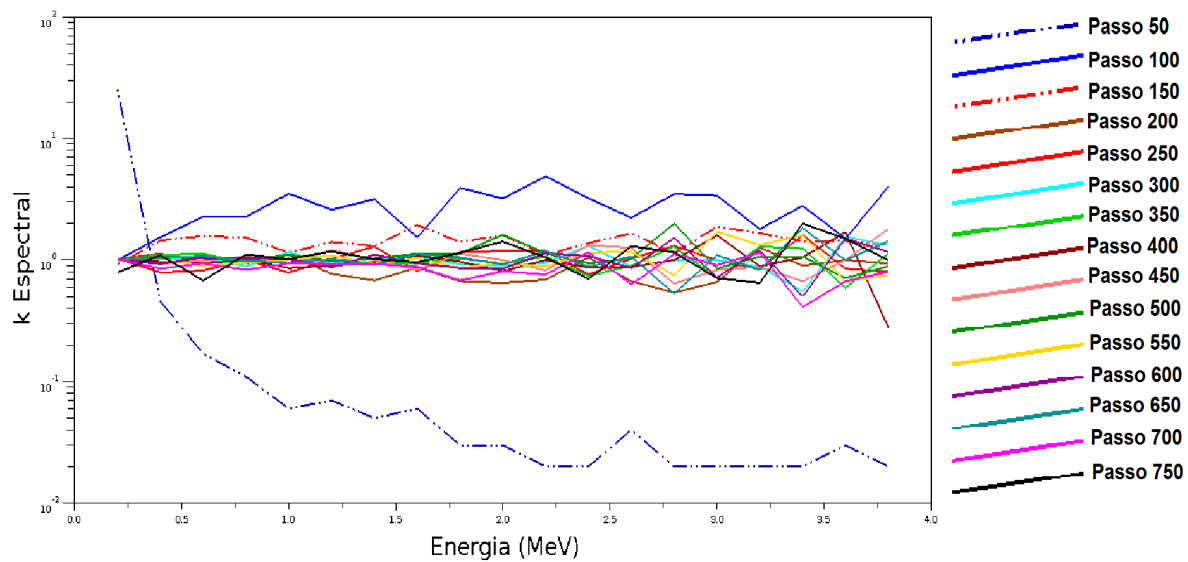


Figura 5.38 – k Monte Carlo espectral ao longo dos passos.

5.4 RESULTADOS OBTIDOS PARA O CASO COM ^{235}U PURO E ÁGUA COMO MODERADOR

Outra forma encontrada para avaliar o método foi rodar o programa com um arranjo mais simples e com resultados mais previsíveis [Camargo, 2010]. Aqui utilizou-se apenas ^{235}U como combustível e água como moderador. O número inicial de nêutrons seguidos é igual a 10^6 , as arestas do cubo medem 8 cm e o meio foi dividido em 125 subvolumes. Foi utilizado um espectro homogêneo para a energia dos nêutrons originados inicialmente ou provenientes da fissão.

A Figura 5.39 mostra o comportamento cíclico, que não aparece nessa forma em um reator real, mas é um artifício que pode ser extraído da contagem de nêutrons individuais. Figura 5.40 traz o espectro de energia após uma sequência de passos de Monte Carlo. Observa-se claramente mudanças mais pronunciadas na região de maior energia do espectro. Com esse resultado mostra-se a mudança no fator de multiplicação espectral com os passos Monte Carlo, o qual pode ser visto na Figura 5.41.

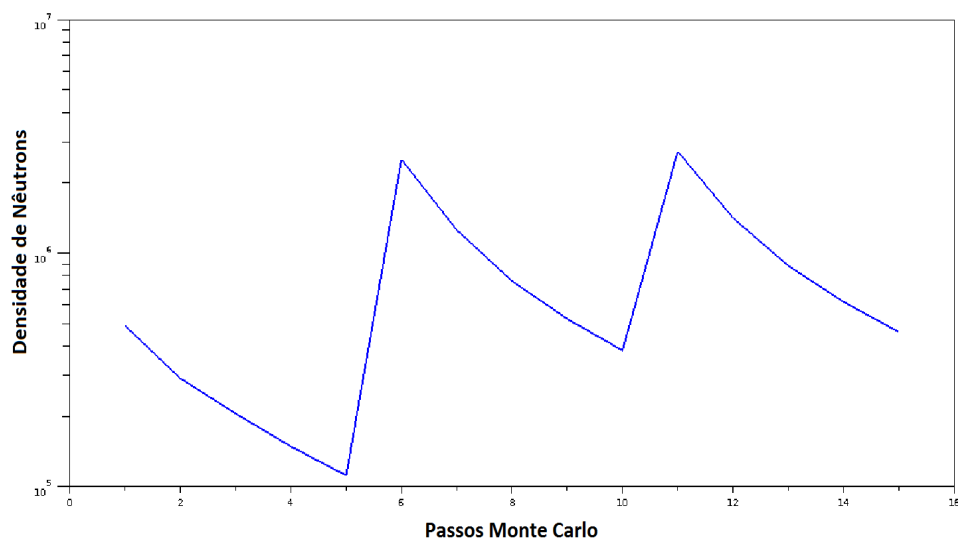


Figura 5.39 – Identificação do ciclo de nêutrons em passos Monte Carlo.

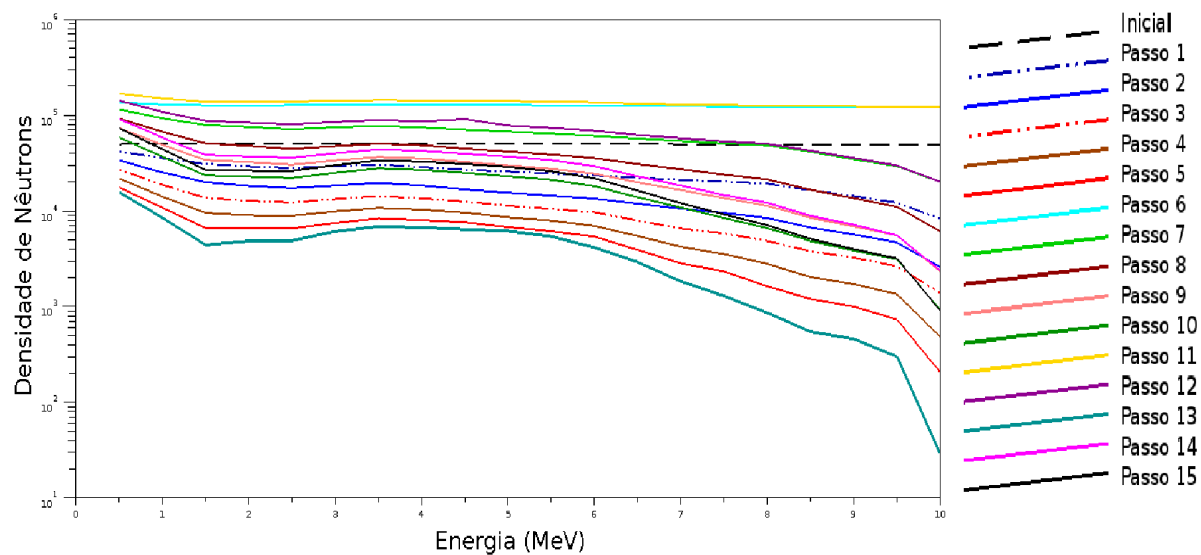


Figura 5.40 – Mudança no espectro de energia dos nêutrons após uma sequência de passos Monte Carlo.

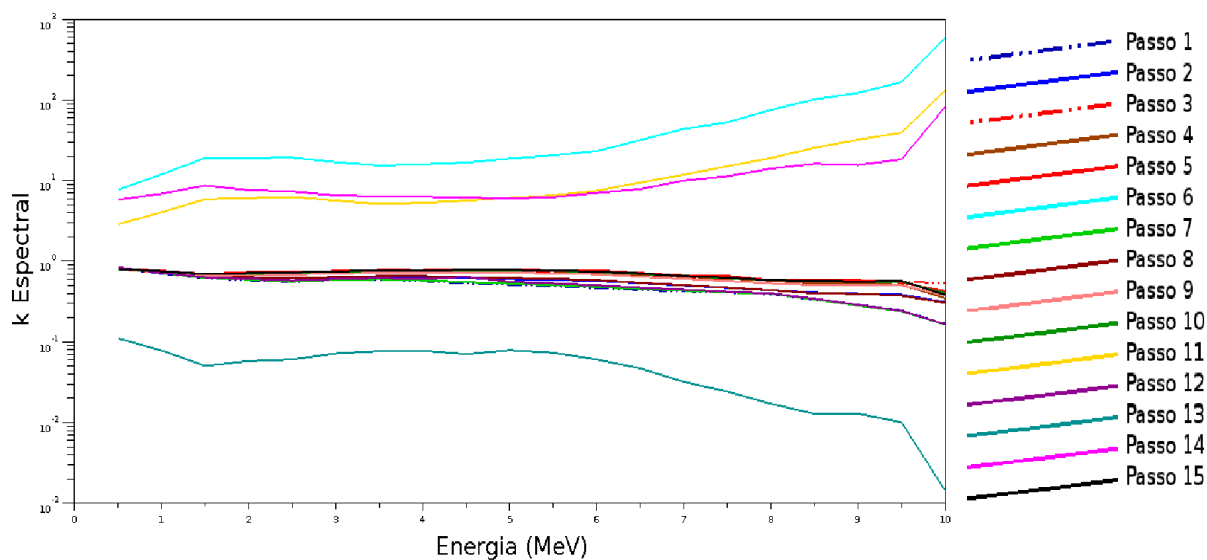


Figura 5.41 – Fator de multiplicação espectral ao longo dos passos Monte Carlo.

6. CONCLUSÃO

Nesta tese desenvolveu-se um modelo estocástico para simular o transporte de nêutrons em um meio heterogêneo, considerando espectros de nêutrons contínuos e as propriedades nucleares com a sua dependência contínua de energia. Este modelo foi implementado utilizando o método Monte Carlo para a propagação dos nêutrons nos diferentes meios junto às interações nos respectivos vértices, onde acontece a alteração da direção de propagação e perda de energia ou remoção do nêutron. Devido à limitação com respeito ao número de nêutrons que pode ser simulado em tempo de processamento computacional aceitável, e o número real como presente nos reatores, introduziu-se o volume de controle variável junto às condições de contornos (pseudo-)periódicas para contornar este problema. A dependência local da fuga dos nêutrons, para fora do volume total em consideração, é corrigida utilizando probabilidades obtidas por uma simulação separada. Isso permitiu analisar o comportamento dos nêutrons em todo o meio, a partir de apenas dois volumes de controles selecionados. Cabe ressaltar que os resultados para as densidades de nêutrons conferem com a utilização de fluxo escalar nulo nos contornos em abordagens analíticas [Vilhena, 2008; Goncalves, 2010], embora as referências citadas utilizam o modelo de difusão de nêutrons optou-se por elas devido à falta de referências para comparação.

No problema de transporte de nêutrons se escolheu o método de Monte Carlo físico clássico pelo fato de decompor em constituintes mais simples o problema de resolver uma equação de transporte, seja ela a equação de Boltzmann ou aproximações em forma de equações de difusão em forma analítica ou numérica. Os constituintes podem ser tratados separadamente, estes são a propagação e a interação, respeitando as leis de conservação de energia e momento, e as relações de probabilidade que determinam a respectiva interação (fissão, espalhamento e captura radiativa). Os problemas na determinação de solução surgem quando a geometria, junto com os materiais, se torna um arranjo tri-dimensional complexo, o que é o caso num núcleo de um reator nuclear. Está-se consciente do fato que o problema abordado nesta tese é longe de ser comparável com a construção de um reator nuclear,

porém nesta discussão o alvo principal era desenvolver o modelo Monte Carlo, implementar o código computacional numa linguagem que permite extensões de forma modular (aqui utilizou-se C++), e avaliar a consistência interna deste código para garantir a fidelidade nos resultados quando arranjos complexos são utilizados. Cabe salientar que o único módulo que precisa alteração é o que contém a geometria tridimensional de interesse. Os módulos que controlam a criticalidade, a propagação dos nêutrons e as interações foram avaliados e considerados satisfatórios. Cabe ressaltar que a propagação de nêutrons não é realizada por tamanhos de passos geométricos fixos, mas sim por um passo único entre vértices, de acordo com a distribuição probabilística para os caminhos livres.

Diferentemente de muitas abordagens na literatura, considerou-se aqui uma geometria tridimensional e a dependência contínua da energia, em vez dos habituais grupos de energia. Para esse fim, fornecemos funções com as seções de choque em forma parametrizada e analítica. Isto permite uma análise detalhada da influência da energia sobre a população de nêutrons e seu impacto sobre o ciclo de vida de nêutrons. Com esses novos resultados foi possível observar as mudanças no espectro de energia dos nêutrons com os passos da simulação. Estes resultados levaram a autora da tese propor uma grandeza relevante para a análise da neutrônica no Monte Carlo, o fator de multiplicação instantâneo espectral Monte Carlo. Esta grandeza pode reproduzir no caso recorrente, ou seja, num estado estacionário, o fator de multiplicação efetivo espectral. Isso é possível uma vez que é identificado o número de passos que corresponde ao ciclo de vida de nêutrons para uma geometria e uma composição química específicas.

Neste trabalho se considerou o transiente partindo de um espectro de nêutrons de fissão, porém a simulação permite analisar transientes arbitrários, variando durante uma simulação o tamanho do volume de controle de acordo com uma função predeterminada para simular alterações na criticalidade. Este conceito de fator de multiplicação pode ser estendido, levando em consideração a dependência local, para identificar a relevância de cada região para sustentar as reações em cadeia. Dos resultados obtidos, mesmo para um arranjo geométrico simples, pode-se concluir a necessidade de considerar a dependência de energia, ou seja, um fator de multiplicação efetivo espectral deve ser introduzido para cada grupo de energia separadamente. A utilização de um k_{eff} único significa independência dos espectro de nêutrons para a sua reprodução. Da simulação, porém, surge que no caso

(pseudo-)estacionário o espectro pode ser constante na média sobre um intervalo de tempo suficientemente grande. Existem discussões na literatura que analisam as flutuações no espectro de nêutrons que corrobora com a existência de um modo recorrente como relatado na referência [Gil, 2001].

Neste estado do desenvolvimento do trabalho os precursores não foram incluídos. A presença dos nêutrons atrasados é especialmente importante quando se trata da questão do tempo de vida efetivo dos nêutrons, uma grandeza relevante para calibrar a unidade de passo Monte Carlo em unidades de tempo, como por exemplo, segundos. Como o programa permite marcar cada geração de nêutrons, apenas é necessário à implementação de um módulo que trate dos decaimentos dos fragmentos da fissão e a sua produção de nêutrons associada, um trabalho a ser considerado futuramente. Adicionalmente pretende-se elaborar num trabalho futuro também as grandezas fluxo escalar (densidade de nêutrons vezes a raiz da energia cinética), taxa de reação (fluxo vezes a seção de choque), fuga local e a sua dependência de energia, e taxa de moderação local com os seus espectros de energia específicos. Futuramente pretende-se também enriquecer o programa “Continuous”, tornando possíveis outros tipos de interações do nêutron durante seu percurso no meio, como por exemplo, o espalhamento inelástico. Também deseja-se vir a considerar espalhamentos que envolvem ganho de energia, mais conhecidos como “up-scattering”.

Dos resultados futuros espera-se obter dados para estabelecer funções analíticas das respectivas distribuições, que por sua vez possam ser utilizadas em abordagens analíticas, semi-analíticas ou híbridas. Concluindo, pode-se dizer que, apesar de ter apenas apresentado resultados que conferem o funcionamento do modelo, abriram-se possibilidades de uma diversidade de análises, as quais podem contribuir para aprender e entender detalhes da neutrônica relevantes na compreensão de reatores nucleares ou no desenvolvimento de concepções novas para reatores.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA). “**Nuclear Data Services**”, <http://www-nds.ipen.br> Acessado no período de março de 2008 a outubro de 2010.

Bell, G. I.; Glasstone, S., 1970. “**Nuclear Reactor Theory**”, Van Nostrand Reinhold Company, New York.

Bodmann, B. E. J.; de Vilhena, M. T.; Ferreira, L. S.; Bardaji, J. B., 2010. “**An Analytical Solver for the Multi-Group Two-Dimensional Neutron-Diffusion Equation by Integral Transform Techniques**”, *Il Nuovo Cimento* **33** C(1), 63 – 70.

Brown, F.B.; Mosteller, R. D., 2004. “**MCNP5 Workshop**”, *LA – UR – 04 – 2647*, Physor-2004, Chicago, IL USA .

Brown, F.B., 2005. “**Fundamentals of the Monte Carlo Particle Transport**”, Lecture notes for Monte Carlo course, Los Alamos National Laboratory, California, U. S. A.

Caldeira, A. D. “**Sobre Bibliotecas de Dados Nucleares**”, São José dos Campos, SP, Brasil.

Camargo, D. Q.; Bodmann, B. E. J.; Garcia, R. D. M.; Vilhena, M. T. M. B., 2009 “**A Three-Dimensional Collision Probability Method: Criticality and Neutron Flux in a Hexahedron Setup**”, *Annals of Nuclear Energy*, **36**, 1614 – 1618.

Camargo, D. Q.; Bodmann, B. E. J.; Vilhena, M. T. M. B.; Leite, S. d. Q. B., 2010 “**A Novel Method for Simulating Spectral Nuclear Reactor Criticality by a Spatially Dependent Control Volume Size**”, Capítulo (in press) de 11 páginas na *Integral Methods in Science and Engineering, Volume 2, Computational Methods* Constanda, Ch.; Harris, P.A. (Eds.), Birkhäuser Boston.

Cramberg, L.; Frye, G.; Nereson, N.; Rosen, L., 1956. “**Fission Neutron Spectrum of U^{235}** ”, *Physical Review*, **103**, 662 – 670.

Cullen, D. E.; Clouse, C. J.; Procassini, R.; Little, R. C., 2003. “**Static and Dynamic Criticality: Are They Different?**”, *UCRL-TR-201506*, Lawrence Livermore National Laboratory, November 2003.

Duderstadt, J. J.; Hamilton, L. J., 1976. “**Nuclear Reactor Analysis**”, John Wiley & Sons, New York.

Duderstadt, J. J.; Martin, W. R., 1979. “**Transport Theory**”, John Wiley & Sons, New York.

FOWL, CERN Program Library Short Write-up W505, 1993.

GEANT-Detector Description and Simulation Tool, CERN Program Library Long Write-up W5013.

GIF-002-00, Generation IV International Form, (Dec. 2002). [http :
//www.ne.doe.gov/genIV/documents/gen_iv_roadmap.pdf](http://www.ne.doe.gov/genIV/documents/gen_iv_roadmap.pdf)

Gil, C. S., 2001. “**Generation of the Continuous Energy Cross Section Data for the MCNP Code**”, Nuclear Data Evaluation Laboratory, Korea Atomic Energy Research Institute, Yusong-gu, Daejeon, Korea.

Glasstone, S.; Edlund, M. G., 1952. “**The Elements of Nuclear Reactor Theory**”, D. Van Nostrand Company, Canada.

Gonçalves, G. A.; Vilhena, M. T.; Bodmann, B. E. J., 2010. “**Heuristic Geometric Eigenvalue Universality**” in a One-Dimensional Neutron Transport Problem with Anisotropic Scattering”, *Kerntechnik*, **75**, 50 – 52.

Fundamentals Handbook, 1993. “**Nuclear Physics and Reactor Theory**”, volume 2. U.S. Department of Energy, Washington, D. C., 20585.

Hartmann, A. K.; Rieger, H., 2002. “**Optimization Algorithms in Physics**”, Wiley-VCH, ISBN 3 – 527 – 40307 – 8.

Lake, J. A.; Bennett, R. G., Kotek, J. F., 2002. “**Next Generation of Nuclear Power**”, Scientific American, **74**, January (2002).

Lamarsh, J. R., 1966. “**Nuclear Reactor Theory**”, Addison-Wesley & Massachusetts, U. S. A.

Leppanen, J., 2005. “**A New Assembly-Level Monte Carlo Neutron Transport Code for Reactor Physics Calculations, in Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications**”, Palais des Papes, Avignon, France, September 12-15, 2005, on CD-ROM, American Nuclear Society, LaGrange Park, IL.

Lewis, E. E.; Miller, W. F., 1984. “**Computational Methods of Neutron Transport**”, John Wiley & Sons, New York.

Portal do Professor - MEC. *http : //portaldoprofessor.mec.gov.br* Acesso: 15/08/2010.

Mori, T.; Okumura, K.; Nagaya, Y., 2000. “**Status of JAERI’s Monte Carlo Code MVP for Neutron and Photo Transport Problems**”, Proc. Monte Carlo 2000 Conference, Lisbon, 625 – 630.

Murata, I.; Mori, T.; Nakagawa, M., 1996. “**Continuous Energy Monte Carlo Calculations of Randomly Distributed Spherical Fuels in High-Temperature Gas-Cooled Reactors Based on a Statistical Geometry Model**”, Nuclear Science and Engineering, **123**, 96 – 109.

Murata, I., 1997. “**New Sampling Method in Continuous Energy Monte Carlo Calculation for Pebble Bed Reactors**”, J. Nucl. Sci. Tech., **34**, 734 – 744.

NEA/NSC/DOC(2003)16. “**Benchmark on Deterministic Transport Calculations Without Spatial Homogenization: A 2-D/3-D MOX Fuel Assembly Benchmark**”, NEA/OECD, ISBN 92 – 64 – 021139 – 6, Paris, France.

Oka, Y., 2001. “**Toward ‘Nuclear Renaissance’, a Perspective of Nuclear Energy and its Research**”, Proc. of the International Conference “Enrico Fermi and Nuclear Energy”, October 15 – 16, Pisa, Italy.

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

Scilab - The Free Software for Numerical Computation www.scilab.org

Sekimoto, H., 2007. “**Nuclear Reactor Theory**”, COE-INES, Tokyo Institute of Technology.

Spainer, J.; Gelbard, S., 1969. “**Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems**”, Addison-Wesley.

Stamatelatos, M. G.; LaBauve, R. J., 1977. “**Methods for Calculating Group Cross Sections for Doubly Heterogeneous Thermal Reactor Systems**”, *LA – NUREG – 6685 – MS*.

The MCNPX Team, 2002. “**MCNPXTM User´s Manual, Version 2.4.0**”, LA-CP-02-408, Los Alamos, NM USA.

Thijssen, J. M.; Gelbard, S., 1999. “**Computational Physics**”, Cambridge University Press, ISBN 0 – 521 – 57588 – 5.

Vilhena, M. T.; Heinen, I. R.; Bodmann, B. E. J., 2008. “**An Analytical Solution for the General Perturbative Diffusion Equation by Integral Transform Techniques**”, *Annals of Nuclear Energy*, **35**, 2410 – 2413.

Walecka, J.D.; 2008. “**Introduction To Modern Physics: Theoretical Foundations**”, World Scientific.

Wolfson, M. M.; Pert, G. J., 1999. “**An Introduction to Computer Simulation**”, Oxford University Press, ISBN 0 – 19 – 850425 – X.

X-5 Monte Carlo Team, 2003. “**MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5**”, *LA – UR – 03 – 1987*, Los Alamos National Laboratory.

Zimmerman, G. B., Adams, M. L., 1991. “**Algorithms for Monte Carlo Particle Transport in Binary Statistical Mixtures**”, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **64**, 287 – 288.

I. ESTUDO COMPARATIVO: PARAMETRIZAÇÕES DAS SEÇÕES DE CHOQUE \times ARQUIVOS DE DADOS NUCLEARES AVALIADOS PARA AS SEÇÕES DE CHOQUE

Durante o desenvolvimento deste trabalho realizou-se um estudo comparativo o qual analisou tanto os tempos de CPU quanto os resultados obtidos pelo programa “Continuous” para dois casos diferentes. No primeiro caso as seções de choque utilizadas nos cálculos realizados pelo programa “Continuous” foram fornecidas a ele por meio de parametrizações das mesmas. Já no segundo caso as seções de choque foram fornecidas por meio de arquivos.

Os arquivos das energias e das seções de choque utilizados no segundo caso, citado anteriormente, foram construídos fazendo o uso de dados nucleares encontrados na Evaluated Nuclear Data File, a qual é uma biblioteca de dados nucleares avaliados. Entretanto, os dados nucleares avaliados desta biblioteca não podem ser utilizados diretamente em cálculos de projeto. Para atingir este propósito, estes dados são submetidos a diversas fases de processamento (pré-processamento) antes de serem utilizados nos cálculos de projeto. Estas etapas caracterizam a geração de dados nucleares pontuais ou multigrupo e, normalmente, são realizadas com os programas pré-processadores [Caldeira] distribuídos pela AIEA ou com o sistema NJOY, de Los Alamos, ambos desenvolvidos em linguagem de programação FORTRAN. Os programas pré-processadores lêem um arquivo que contém dados nucleares avaliados no formato ENDF/B, realizam um determinado tipo de processamento nestes dados, que pode ser uma ou mais operações independentes, e imprimem o resultado em outro arquivo, também no formato ENDF/B. Neste estudo foram utilizados os programas pré-processadores LINEAR, RECENT e SIGMA1. Os arquivos que compõem as bibliotecas de dados nucleares avaliados podem ser recuperados através da internet no site da Agência Internacional de Energia Atômica [AIEA].

No primeiro caso em que as seções de choque são fornecidas pelas parametrizações o programa fornecer a energia do nêutron e em seguida o programa verifica em que intervalo de energia o nêutron gerado se encaixa e estima-se, por meio de uma função definida para

esse intervalo, a seção de choque desejada. Já no segundo caso, onde as seções de choque são fornecidas por arquivos de dados, o programa fornece a energia do nêutron e em seguida o programa realiza uma leitura nos arquivos de dados até localizar o intervalo de energia onde o nêutron gerado se encontra, depois de feito isso, o programa realiza uma interpolação linear para estimar o valor da seção de choque desejada. Ao detectar o intervalo de energia onde se encontra a energia do nêutron que está sendo analisando, o programa realiza uma interpolação linear entre as seções de choque correspondentes aos valores superior e inferior do intervalo de energia selecionado. No primeiro caso estudado os intervalos de valores de energia são grandes, sendo o número máximo de intervalos igual a 700, enquanto no segundo caso, os arquivos de dados fornecem pares de energia e seção de choque, onde alguns arquivos chegam a ter mais de 60000 pares de energia e seção de choque.

Para realizar esse estudo comparativo, foi definido inicialmente que o programa seguiria as histórias de vida de 10^4 nêutrons, não inclusos nesse valor os nêutrons que seriam originados na fissão, em um cubo de aresta igual a 10 cm. Quando esse estudo foi realizado o cubo simulado pelo programa era composto apenas de ^{235}U como combustível e de água (H_2O) como moderador. O cubo era constituído de duas partes iguais, uma metade composta de combustível e a outra metade composta de moderador. O programa armazenou o número de fissões, de espalhamentos, de fugas e de capturas radiativas sofridos pelos nêutrons durante a simulação, e também o número total de histórias de nêutrons seguidas (incluindo aqui os nêutrons provenientes da fissão) e o tempo de CPU, esses resultados se encontram na Tabela I.1. O compilador utilizado nesse estudo comparativo foi o gcc, o programa foi rodado no sistema operacional Linux em um computador com processador Intel Core 2 Duo de 1.83 GHz e 2 GB de RAM.

Analisando a Tabela I.1 observa-se que os resultados obtidos em ambos os casos possuem a mesma ordem de grandeza, mas no primeiro caso o programa tem um tempo de processamento muito menor e pode ser rodado em um computador simples, enquanto no segundo caso se o interesse fosse simular um processo mais realístico seria necessário um computador com configurações melhores. Devido ao fato do programa ter que ler um grande número de dados antes de localizar o intervalo de energia onde a energia do nêutron analisado se encontra, no caso onde as seções de choque são fornecidas por arquivos, faz com que o programa tenha um tempo de CPU muito maior do que quando as seções de choque

são fornecidas por meio das parametrizações.

Tabela I.1 – Estudo comparativo entre os resultados obtidos utilizando as parametrizações das seções de choque com os resultados obtidos pelo uso de arquivos de dados nucleares avaliados para as seções de choque.

Tipo de Interação	Caso 1	Caso 2
Espalhamentos no U-235	44147	38613
Capturas no U-235	454	422
Fissões no U-235	14287	13425
Espalhamentos na água	30460	26052
Capturas na água	2	0
Fugas	30728	29519
Total de Histórias	45482	43366
Tempo de CPU (segundos)	1.35	713.6

Chama-se atenção aqui ao fato de se ter um número pequeno de histórias de nêutrons seguidos, acredita-se que se esse número fosse maior os resultados se aproximariam ainda mais um do outro, pois para simular o comportamento médio dos nêutrons seria necessário acompanhar um número muito maior de histórias de vida de nêutrons. Por meio desse estudo comparativo, pode-se, de alguma forma, validar as parametrizações feitas para as seções de choque, uma vez que o uso dessas parametrizações não apresenta variações significativas nos resultados.

II. CONCEITOS BÁSICOS

A seguir serão apresentados alguns conceitos básicos utilizados na tese.

II.1 CLASSIFICAÇÃO DAS REAÇÕES DE ACORDO COM AS ENERGIAS DOS NÊUTRONS

As interações de nêutrons com o núcleo são muito dependentes de sua energia cinética, levando a classificar as reações com nêutrons dependendo da região do espectro de energia, como:

- *Reações Térmicas*, onde as energias dos nêutrons são comparáveis à energia térmica dos átomos em um meio hospedeiro, por exemplo, no núcleo de um reator nuclear, em temperatura ambiente, a energia dos nêutrons térmicos é de aproximadamente 0.025 eV ;
- *Reações Epitérmicas*, cujas as energias dos nêutrons são em torno 1 eV ;
- *Reações Rápidas*, nas quais os nêutrons apresentam energias na faixa de 0.1 a 10 MeV ;
- *Reações de Alta Energia*, onde os nêutrons possuem energias acima de 10 MeV até 100 MeV .

Para regiões de mais baixa energia dos nêutrons pode-se usar ainda a denominação de frios ou extra frios.

II.2 SEÇÃO DE CHOQUE MICROSCÓPICA (σ)

É a área virtual que o núcleo de um dado isótopo apresenta para que um determinado tipo de reação ocorra, no caso presente, reação nuclear, portanto, a seção de choque microscópica está relacionada com a probabilidade de ocorrer uma dada interação (absorção, espalhamento...) por átomo do alvo por nêutron incidente - unidade: $\text{barns} = 10^{-24} \text{ cm}^2$.

Analisando o carbono, para exemplificar, observa-se que ele é praticamente um espalhador puro de nêutrons térmicos. Isto é, os átomos de carbono apresentam uma grande área superficial para os nêutrons térmicos para as reações de espalhamento e apresentam uma

área extremamente reduzida para nêutrons térmicos para reações de absorção, as seções de choque microscópicas de espalhamento e de absorção do carbono ($^{12}_6C$) são iguais a, respectivamente, 4.8 *barns* e 0.0034 *barns* [Handbook, 1993; Lamarsh, 1966].

Para obter a média de espalhamentos sofridos por um dado nêutron antes de ser absorvido pelo meio onde ele está se deslocando, basta dividir a seção de choque microscópica de espalhamento pela seção de choque microscópica de absorção (σ_s/σ_a).

II.3 SEÇÃO DE CHOQUE MACROSCÓPICA (Σ)

É definida como o produto entre a seção de choque microscópica dos átomos que constituem alvo e a densidade atômica (átomos por cm^3) do mesmo, portanto, a seção de choque macroscópica está relacionada com a probabilidade de ocorrer uma dada interação por unidade de comprimento - unidade: cm^{-1} .

Quanto maior for a seção de choque macroscópica do meio, menor será o *livre caminho médio* (*m.f.p.*, “mean free path”) do nêutron neste meio, isto é, menor será a distância média percorrida pelos nêutrons até que uma dada reação ocorra.

II.4 MODERAÇÃO E TERMALIZAÇÃO DE NÊUTRONS

No estudo da fissão na blindagem e mesmo na difração de nêutrons torna-se importante estudar o processo pelo qual os nêutrons, desde que são produzidos, têm sua energia abrandada num processo denominado *moderação*, até atingirem energias da ordem de $k_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann, ou térmicas. Com essas energias, os nêutrons perdem e ganham pequenas quantidades de energia, num processo denominado *termalização*, onde a população de nêutrons adquire uma distribuição de energia do tipo gaussiana.

Quando um nêutron é espalhado elasticamente por um núcleo de um meio material, o núcleo sofre um recuo da sua posição de colisão. A energia cinética do nêutron espalhado será, portanto, menor do que a energia do nêutron incidente, mas essa diferença de energia se refere ao recuo do núcleo, sem haver a excitação do mesmo.

A redução de energia do nêutron nas colisões sofridas durante o processo de moderação pode ser descrita em termos de “média perda de energia”. Por exemplo, um nêutron que possuía energia E_0 antes da colisão e E_1 após a colisão, terá uma perda de energia ($E_0 -$

E_1). A média desta perda de energia para um grande número de colisões, com parâmetros de impacto diferentes, ou seja, ângulos de espalhamento diferentes, é denominado “média perda de energia por colisão”.

Entretanto, é conveniente expressar o processo de moderação através do valor de “diferença média do logaritmo natural da energia do nêutron antes e após a colisão”, valor denominado “Decremento Logarítmico de Energia”, ξ , o qual é expressado matematicamente por

$$\xi = \ln \frac{E_0}{E_1}. \quad (\text{II.1})$$

Como pode ser visto, ξ é uma grandeza adimensional. A razão para usar a escala logarítmica de energia é que no espalhamento elástico o nêutron tende a perder uma “fração” de sua energia, assim, esta escala é apropriada quando a moderação por espalhamento é predominante.

Na teoria de moderação, ainda é conveniente usar a variável denominada *letargia*, u , definida como

$$u = \ln \frac{E_0}{E}, \quad (\text{II.2})$$

onde E_0 é a energia máxima do sistema; u também é adimensional. Desta forma, vê-se que ξ é o incremento médio de letargia por colisão. No modelo de Fermi [Lamarsh, 1966] assume-se que todo o nêutron ganha *exatamente* ξ em letargia a cada colisão, isto é, os nêutrons são tratados como o comportamento médio dos nêutrons. Portanto, a letargia altera-se somente em unidades de ξ , o nêutron poderia ter somente letargias variando discretamente. Entretanto, é desejável tratar com variáveis contínuas e, assim, postula-se que a letargia varia continuamente e que assume o valor $n\xi$ após n colisões. Assim, o número de colisões pode também ser visto como uma variável contínua e, por esta razão, o modelo de Fermi também é conhecido como “modelo contínuo de moderação” (para maiores informações consultar bibliografia sugerida [Handbook, 1993; Lamarsh, 1966]).

Na Tabela II.1 [Sekimoto, 2007] encontra-se tabelado os valores do ξ para diferentes materiais. Observando a tabela, nota-se que para se obter uma moderação rápida dos nêutrons é preferível usar como moderador materiais com baixo número atômico, como a

água, a água pesada e o grafite.

Tabela II.1 – Valores do incremento médio de letargia por colisão para diferentes materiais.

Núcleo	Nº de massa	ξ ou $\bar{\xi}$
Hidrogênio	1	1,000
Deutério	2	0,725
Hélio	4	0,425
Berílio	9	0,206
Carbono	12	0,0,158
Urânio	238	0,0084

II.5 VARIÂNCIA σ^2

Para estudar a variância [Santoro, 2001] se considera a integral

$$m = \int_0^1 f(x)dx, \quad (\text{II.3})$$

onde m , o valor da integral, é também o valor médio da função $f(x)$. Assim, a variância é definida por

$$\sigma^2 = \int_0^1 [f(x) - m]^2 dx. \quad (\text{II.4})$$

A variância mede as flutuações de uma função $f(x)$ no intervalo $[0, 1]$. Quanto maior σ^2 maior é a flutuação da função $f(x)$ em torno de seu valor médio.

Supondo que se irá gerar números aleatórios r_k com $0 \leq r_k \leq 1$, onde $k = 1, 2, \dots, N$, tal que os valores entre 0 e 1 sejam igualmente prováveis. Isto que dizer que os r_k são uniformemente distribuídos no intervalo de 0 a 1. Vamos considerar os números r_1, r_2, \dots, r_N como uma amostra para o cálculo da integral da função $f(x)$. A aproximação para o valor da integral é uma média aritmética dos N números resultantes de $f(r_k)$, a qual tem a denotação

\bar{m} é obtida pela seguinte equação:

$$\bar{m} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N f(r_k), \quad (\text{II.5})$$

essa é a maneira de se estimar, através do Método de Monte Carlo, o valor aproximado da integral da função $f(x)$.

Usando a linguagem de Física de Partículas, r_k é chamado de evento e $f(r_k)$ é o peso associado ao evento. Como r_k é um número aleatório, então \bar{m} também é uma variável aleatória, tal que se considerar outro conjunto r_k obtém-se outro valor \bar{m} , portanto, é necessário calcular o desvio do valor médio.

O desvio de \bar{m} do seu valor mais provável é dado por

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N [f(r_k) - \bar{m}]^2, \quad (\text{II.6})$$

o qual se aproxima da equação II.4 assim como \bar{m} de m . Supondo que as variáveis aleatórias x_i , com $i = 1, 2, \dots, N$, são distribuídas de tal forma que suas médias são m_i e as variâncias σ_i^2 . Sob condições gerais, a distribuição da soma $x = (x_1 + x_2 + \dots + x_N)/N$ para N grande se aproxima da distribuição normal,

$$N(x, m, \sigma) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{x-m}{2\sigma}\right], \quad (\text{II.7})$$

com média

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_i \quad (\text{II.8})$$

e variância

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2. \quad (\text{II.9})$$

No presente caso, os números aleatórios são distribuídos com média m e variância σ^2 . Então, para N grande, \bar{m} converge para m e a variância da distribuição em \bar{m} é $(1/N)\sigma^2$. Assim, o resultado da integração por Monte Carlo é expresso por

$$m = \bar{m} + \frac{\bar{\sigma}}{\sqrt{N}}. \quad (\text{II.10})$$

