

**Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics**

---

# Estudo da Criticalidade da Equação de Difusão Monoenergética com Fonte de Fissão através do Método Monte Carlo Físico

Fernanda Tumelero<sup>1</sup>Bardo E. J. Bodmann<sup>2</sup>

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS

**Resumo.** Neste trabalho estuda-se a criticalidade de reatores nucleares através do método Monte Carlo da Equação de Difusão Monoenergética de Nêutrons com fonte de fissão. Considera-se vácuo como condição de contorno em todas as fronteiras do meio, assim apenas as fugas serão consideradas e não há nêutrons entrando no meio a partir do ambiente externo às fronteiras, que limitam o volume total de simulação. Utiliza-se um grupo de energia em um reator homogêneo, isotrópico e esférico. A técnica consiste em seguir cada uma das muitas partículas, iniciando com o seu surgimento a partir de uma fissão e terminando com sua absorção ou fuga do sistema. Resultados numéricos são apresentados para ilustrar a aplicação do método para o estudo da criticalidade.

**Palavras-chave.** Método de Monte Carlo, Difusão de nêutrons, Criticalidade

## 1 Introdução

Uma partícula pode atravessar/penetrar materiais interagindo com os átomos que os constituem. As interações que ocorrem são estatísticas por natureza com suas probabilidades determinadas por seções de choque. É impossível prever com exatidão qual distância uma partícula percorrerá em um meio até interagir, mas é possível ter a previsão da distribuição das distâncias que um grande número de partículas percorrerão antes da primeira interação.

Métodos estatísticos utilizados na simulação de sistemas físicos e matemáticos operam devidamente como os métodos numéricos usuais para a solução das equações diferenciais desses referidos sistemas. O método de Monte Carlo Físico pode ser definido como método de simulação estatística de alguns modelos probabilísticos ou analógicos de um dado problema em que não se utiliza a equação de difusão diretamente. O balanço de partículas entre os vários eventos e as fugas é simulado numericamente e tudo o que se necessita são expressões matemáticas completas das relações de probabilidade para os diversos eventos possíveis, definidos previamente pelo modelo.

---

<sup>1</sup>fernanda.tumelero@yahoo.com.br

<sup>2</sup>bardo.bodmann@ufrgs.br

O objetivo deste trabalho é estudar a criticalidade de reatores nucleares através do método Monte Carlo da Equação de Difusão Monoenergética com fonte de fissão, dada por:

$$-\nabla \cdot D(r)\nabla\phi(r) + \Sigma_a(r)\phi(r) = \frac{1}{k_{eff}}\nu\Sigma_f(r)\phi(r), \quad (1)$$

onde  $\phi(r)$  representa o fluxo escalar de nêutrons na posição  $r$ ,  $\nu$  representa o número médio de nêutrons emitidos na fissão,  $D$  é o coeficiente de difusão,  $\Sigma_a$  e  $\Sigma_f$  são as seções de choque de absorção e fissão, e  $k_{eff}$  representa fator de multiplicação efetivo.

A técnica consiste em seguir cada uma das muitas partículas de uma fonte por toda sua "vida" até sua "morte" (absorção ou fuga) [3]. São utilizados números aleatórios a cada interação para determinar qual reação ocorreu, a nova direção que a partícula assumirá e quantos nêutrons serão inseridos se o processo que aconteceu foi de fissão. A história de uma partícula inicia com o seu surgimento a partir de uma fissão ou de uma fonte externa (se existir) e termina com sua absorção ou fuga do sistema.

Para aplicação da técnica, um grande número de histórias deve ser avaliado para descrever apropriadamente o que ocorre no sistema. Então, acompanhando um grande número dessas histórias, os resultados podem ser analisados para obter estimativas do comportamento esperado da população de partículas.

## 2 As trajetórias dos nêutrons

Considera-se um meio homogêneo ao qual a partícula se move. A partícula tem uma propagação livre até colidir com um átomo do material. As variações da posição e da direção são determinados estatisticamente [1], portanto há uma distribuição de probabilidade para cada uma dessas possíveis direções, mas vale destacar que neste trabalho assume-se isotropia. Com o intuito de rastrear a partícula durante sua história, empregam-se as variáveis  $(x, y, z)$  para as coordenadas espaciais e as coordenadas esféricas  $(\theta, \phi)$  da direção da partícula. A trajetória de uma partícula de colisão para colisão pode ser construída como uma sucessão de estados, onde o  $i$ -ésimo estado é [2]:

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

Cada estado sucessivo é uma função somente do estado anterior, com exceção do estado inicial. Neste trabalho, essas condições iniciais são escolhidas por um processo aleatório homogêneo que cria as partículas dentro de uma esfera de raio  $r$ . Em seguida, determina-se a distância que o nêutron percorrerá até sofrer sua primeira interação. Então, se determinam os ângulos  $\theta$  e  $\phi$ , os quais definem a direção que o nêutron irá se deslocar. Os ângulos são gerados aleatoriamente, pela rotina *rand* presente no software *SciLab*.

O nêutron pode interagir de várias maneiras com a matéria [4], mas a possibilidade de haver ou não uma dada interação vai depender das características do material. As interações consideradas neste trabalho são: espalhamento, absorção e fissão. A soma das probabilidades de todos os tipo de interação possíveis deve ser igual à unidade. Se a reação ocorrida é de absorção, a história do nêutron termina. 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 acompanhadas. Um nêutron pode sofrer um número  $n$  de espalhamentos antes de ser absorvido, de produzir fissão ou então escapar do meio. 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. O programa é encerrado quando a história de vida de todos os nêutrons forem acompanhadas.

### 3 A estimativa do fator de multiplicação de nêutrons aplicando o Método de Monte Carlo

Quando um reator está em estado de equilíbrio, ele está operando em ou perto da criticalidade, ou seja, o fator de multiplicação de nêutrons  $k_{eff}$  é quase igual à unidade. Analisando o fator de multiplicação efetivo de nêutrons, pode-se classificar um reator nuclear como: Crítico ( $k_{eff} = 1$  - o número de fissões permanece o mesmo e portanto também a potência térmica do reator); Subcrítico ( $k_{eff} < 1$  - o reator nessa condição apaga após um certo tempo de funcionamento); Supercrítico ( $k_{eff} > 1$  - 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).

É de suma importância, em sistemas que apresentam materiais físeis como nos reatores nucleares, a determinação do fator de multiplicação de nêutrons efetivo ( $k_{eff}$ ). Na técnica de Monte Carlo, um grupo de histórias de nêutrons é chamado de ciclo. O fator de multiplicação efetivo do sistema é dado pela razão entre o número de nêutrons gerados no ciclo (através das fissões) e o número de histórias de nêutrons contabilizadas. Da mesma maneira, contam-se as fugas e capturas de nêutrons. Simulando muitos ciclos (que contém as histórias de um determinado número de nêutrons) obtém-se o valor do fator de multiplicação médio do sistema, dado por [3]:

$$\bar{k} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n k_i, \quad (3)$$

sendo  $\bar{k} = k_{eff}$  médio do sistema;  $n$  é o número de ciclos ativos;  $k_i = k_{eff}$  de cada ciclo.

Vale destacar que 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. Lembra-se também, que utiliza-se apenas um grupo de energia em um reator homogêneo, isotrópico e esférico.

### 4 Resultados Numéricos

Foram realizados 6 casos analisando 200 ciclos (gerações de nêutrons) para diferentes raios de esfera e número de nêutrons. Os casos estão divididos da seguinte maneira: CASO 1 (Raio da esfera = 0,5 e Número de partículas = 10 mil); CASO 2 (Raio da esfera = 1 e Número de partículas = 10 mil); CASO 3 (Raio da esfera = 2 e Número de partículas =

10 mil); CASO 4 (Raio da esfera = 3 e Número de partículas = 10 mil); CASO 5 (Raio da esfera = 2 e Número de partículas = 100 mil); CASO 6 (Raio da esfera = 3 e Número de partículas = 100 mil).

Os quatro primeiros casos foram executados para comparar as consequências da geometria no fator de multiplicação efetivo. Já os casos 3 e 5, 4 e 6 tem o intuito de comparar a utilização de 10 mil e 100 mil partículas.

Inicialmente apresenta-se os gráficos (fator de multiplicação efetivo e nêutrons gerados a cada ciclo) para o Caso 1 (Raio da esfera = 0,5 e Número de partículas= 10 mil) na Figura 1.

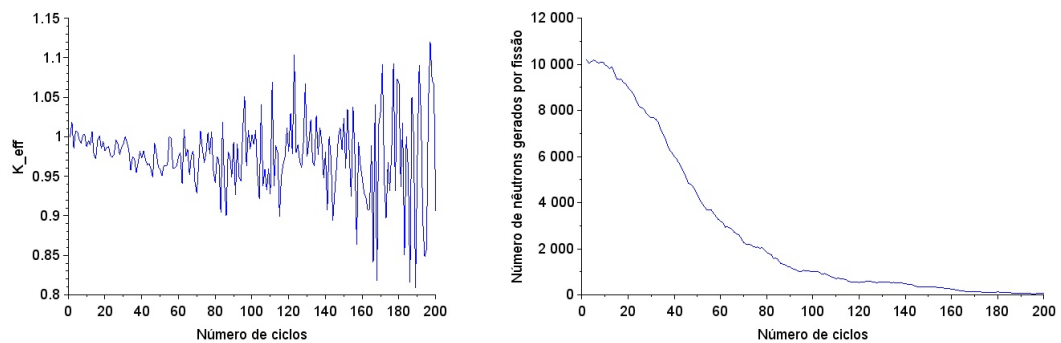


Figura 1: Gráficos para o Caso 1 para o fator de multiplicação efetivo e nêutrons gerados a cada ciclo, respectivamente.

O primeiro caso teve como fator de multiplicação efetivo médio o valor de 0,9780288. Devido a este resultado, o número de nêutrons gerados por fissão, que são os nêutrons que iniciam o próximo ciclo (pois as histórias são acompanhadas até a "morte" do nêutron no reator por captura ou fuga), diminuíram com o passar dos ciclos. Deste modo, como a população de nêutrons foi diminuindo ao longo do tempo, o número de espalhamento, captura e fissão foram reduzindo também, proporcionalmente à população neutrônica.

Para o segundo caso (Raio da esfera = 1 e Número de partículas= 10 mil), são apresentados os gráficos para o fator de multiplicação efetivo e número de nêutrons gerados na Figura 2.

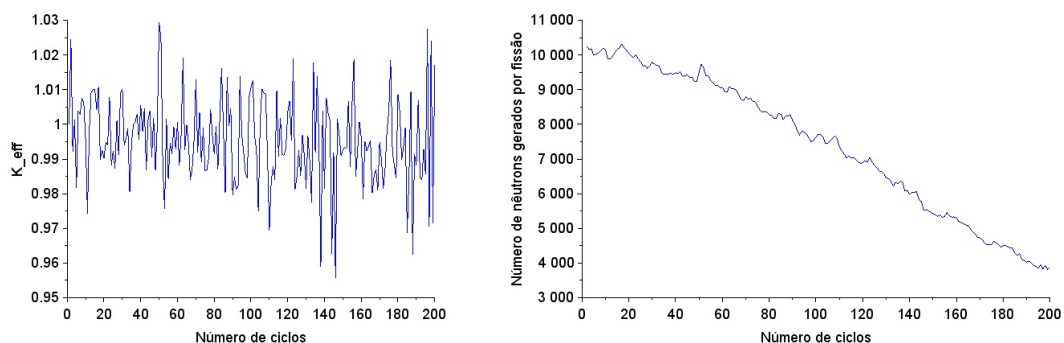


Figura 2: Gráficos para o Caso 2 para o fator de multiplicação efetivo e nêutrons gerados a cada ciclo, respectivamente.

O Caso 2 teve como fator de multiplicação efetivo médio o valor de 0,9953552. Deste

modo, a população neutrônica diminui ao longo dos ciclos, mas com menor intensidade do que no caso anterior. Devido a geometria do sistema, o número de fugas é menor que no Caso 1, mas ainda acaba por interferir no  $k_{eff}$  por fazer com que as histórias dos nêutrons sejam mais "curtas", pois tendo um raio da esfera maior, menos nêutrons fugiriam do sistema e poderiam causar mais fissões. Cabe ressaltar também, que o  $k_{eff}$  neste caso varia entre  $]0,95; 1,03[$  enquanto que no caso anterior variava entre  $]0,8; 1,15[$ , ou seja, devido a geometria do sistema ter aumentado, reduziu-se a variação do fator de multiplicação efetivo em aproximadamente 0,1.

No terceiro caso (Raio da esfera = 2 e Número de partículas = 10 mil), os resultados são apresentados na Figura 3.

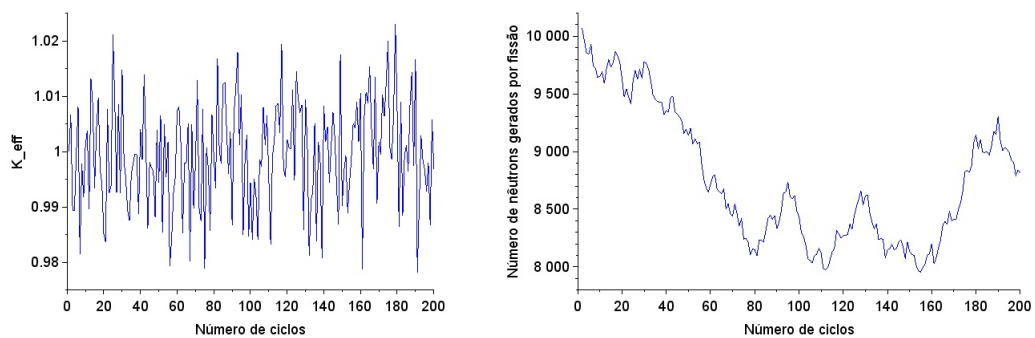


Figura 3: Gráficos para o Caso 3 para o fator de multiplicação efetivo e nêutrons gerados a cada ciclo, respectivamente.

Para o Caso 3, o fator de multiplicação efetivo médio teve o valor de 0,9994133. Assim, a população neutrônica continua diminuindo ao longo dos ciclos, mas em menor quantidade do que os casos anteriormente apresentados. A variação do  $k_{eff}$  ficou aproximadamente entre  $]0,98,1,02[$ , menor que nos casos anteriores. Pode-se observar também que o número de nêutrons gerados por fissão não reduz-se tanto, mantendo o sistema em um estado mais equilibrado comparado aos casos já citados. Cabe ressaltar também, que como foi aumentado o tamanho do raio da esfera, um número menor de nêutrons está fugindo do sistema.

Já para o quarto caso (Raio da esfera = 3 e Número de partículas= 10 mil), os resultados encontrados estão presentes na Figura 4.

Analisando o quarto caso, obteve-se como fator de multiplicação efetivo médio de todos os ciclos o valor de 1,0001766. Dos casos em que foi utilizado 10 mil nêutrons, foi este que o  $k_{eff\text{méd}}$  ficou mais próximo de 1. A variação do  $k_{eff}$  se restringiu entre aproximadamente  $]0,98, 1,03[$ . Ao contrário dos casos citados anteriormente, como  $k_{eff\text{méd}} > 1$ , a população de nêutrons tendeu a crescer ao longo dos ciclos. Devido a geometria deste caso, durante os 200 ciclos executados nenhum nêutron fugiu do sistema.

No Caso 5 (Raio da esfera = 2 e Número de partículas= 100 mil), os resultados obtidos são apresentados na Figura 5.

No caso 5, encontrou-se como fator de multiplicação efetivo médio o valor de 0,9998708, um pouco maior que o Caso 3 (que possuía o mesmo raio da esfera). Além disso, o  $k_{eff}$  apresentou valores entre  $]0,99,1,01[$ , menor que todos os casos estudados anteriormente. Através do estudo dos gráficos, pode-se perceber que a população neutrônica mantém-

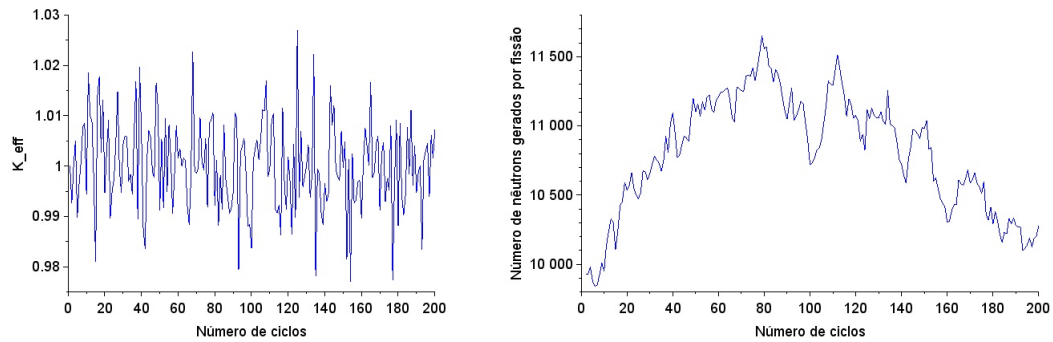


Figura 4: Gráficos para o Caso 4 para o fator de multiplicação efetivo e nêutrons gerados a cada ciclo, respectivamente.

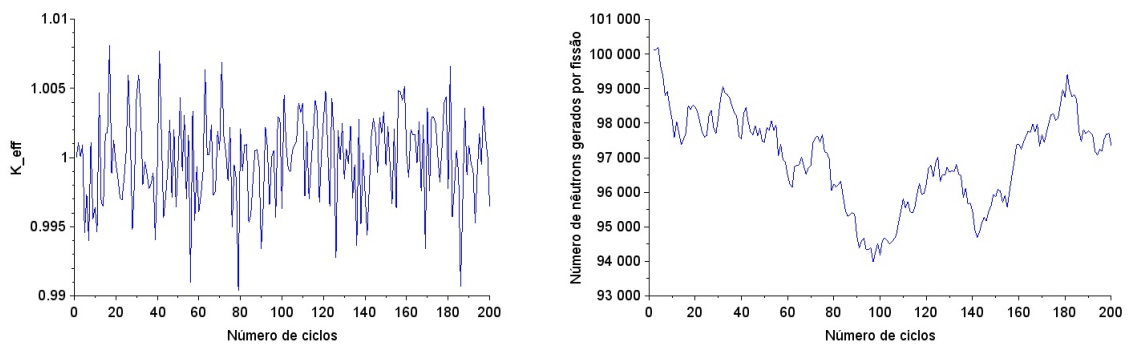


Figura 5: Gráficos para o Caso 5 para o fator de multiplicação efetivo e nêutrons gerados a cada ciclo, respectivamente.

se mais estável quando comparada aos casos anteriores, tendo um leve decréscimo justificado pelo valor do  $k_{eff\text{ médio}}$ . Já sobre o número de nêutrons que fugiram do sistema, essa quantidade não compromete as gerações da população de nêutrons. Portanto, a utilização de 100 mil partículas possibilitou obter resultados mais equilibrados para o estudo da criticidade, mas deve-se lembrar que aumentar o número de partículas aumenta substancialmente o tempo computacional para a execução do programa.

Por fim, o último caso (Raio da esfera = 3 e Número de partículas = 100 mil) apresenta-se os resultados na Figura 6.

No último caso, obteve-se como fator de multiplicação efetivo médio o valor de 1,000224, um pouco maior que no Caso 4 (que possuía o mesmo raio da esfera). Os valores do  $k_{eff}$  ficaram bem próximos ao caso anterior. Através da análise dos gráficos, pode-se perceber que, assim como no Caso 5, a população neutrônica mantém-se mais estável quando comparada aos casos em que se utilizou 10 mil partículas. Nesse caso, praticamente não houveram fugas do sistema.

## 5 Conclusões

Neste trabalho, apresentou-se uma abordagem estocástica para simular a difusão de nêutrons para o estudo da criticidade de um reator, considerando vácuo como condição de

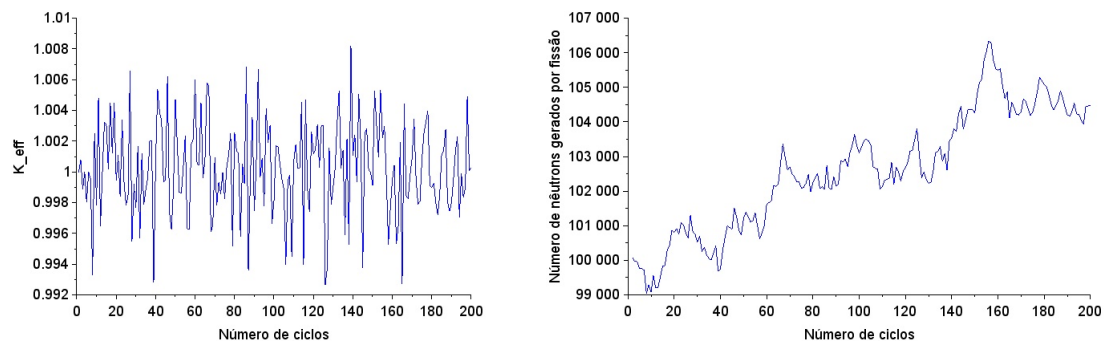


Figura 6: Gráficos para o Caso 6 para o fator de multiplicação efetivo e nêutrons gerados a cada ciclo, respectivamente.

contorno em todas as fronteiras do meio e um grupo de energia em um reator homogêneo, isotrópico e esférico. Este estudo deu-se pela implementação do método Monte Carlo físico através das relações de probabilidade que determinam a respectiva interação (absorção, fuga, espalhamento e fissão). As simulações numéricas mostraram as consequências da geometria do sistema através dos valores obtidos com vários casos considerados para o fator de multiplicação efetivo e o número de nêutrons gerados a cada ciclo pela fissão, alterando também a fuga de nêutrons do volume de controle. Também foi possível observar, que considerando um número maior de partículas para a simulação, obteve-se resultados mais equilibrados. A análise do comportamento do fator de multiplicação efetivo de um reator crítico permite, considerando as características do sistema estudado, sustentar reações em cadeia.

## Agradecimentos

A primeira autora agradece a Comissão Nacional de Energia Nuclear - CNEN.

## Referências

- [1] G. I. Bell and S. Glasstone. Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand Reinhold Company, New York, 619 pages, 1970.
- [2] D. Q. Camargo, Um modelo estocástico de simulação neutrônica considerando o espectro e propriedades nucleares com dependência contínua de energia, Tese de Doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.
- [3] H. M. Dalle, Simulação do reator TRIGA IPR – RI utilizando métodos de transporte por Monte Carlo, Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas, 2005.
- [4] S. Glasstone and M. C. Edlund. The Elements of Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand, Canadá, 416 pages, 1952.