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

PARAMETRIZAÇÕES DE SEÇÕES DE CHOQUE E DERIVAÇÃO DE UMA PSEUDO-SEÇÃO DE CHOQUE DE ESCAPE A PARTIR DE SIMULAÇÕES MONTE CARLO APLICADAS AO TRANSPORTE DE NÊUTRONS

por

Daniel Gustavo Benvenutti

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2021

PARAMETRIZAÇÕES DE SEÇÕES DE CHOQUE E DERIVAÇÃO DE UMA PSEUDO-SEÇÃO DE CHOQUE DE ESCAPE A PARTIR DE SIMULAÇÕES MONTE CARLO APLICADAS AO TRANSPORTE DE NÊUTRONS

por

Daniel Gustavo Benvenutti
Engenheiro Mecânico

Dissertação 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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Christian Constanda ..... The University of Tulsa, USA

Prof. Dr. Richard Vasques ..... The Ohio State University, USA

Prof. Dr. Rogério José Marczak ..... PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 9 de Desembro de 2021

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha mãe, Maria Izabel, pelo amor e apoio incondicional durante toda a minha vida;

Agradeço ao professor Bardo Ernst Josef Bodmann, pela confiança, dedicação e amizade durante a realização deste trabalho;

Agradeço ao amigo e colega de pesquisa Luiz Felipe Fracasso Chaves Barcellos, que dispôs seu tempo para me ajudar em diversas ocasiões e foi fundamental na conclusão deste trabalho.

Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo suporte financeiro para a elaboração desta dissertação;

Por fim, agradeço à minha namorada, Laura, e ao meu irmão, Cristiano, pela compreensão e suporte nesta etapa da minha vida.

RESUMO

Neste trabalho, duas contribuições no estudo de transporte de nêutrons foram realizadas. A primeira refere-se à parametrização das seções de choque nucleares por meio de funções analíticas compostas por funções racionais, polinomiais e de janela. Por se tratar de um problema não linear, o algoritmo de Levenberg-Marquard foi utilizando no processo de otimização. A segunda contribuição se refere a uma nova abordagem para lidar com problemas de transporte de nêutrons que envolvem o escape destes em meios finitos, como reatores nucleares. Para isto, a derivação de uma pseudo-seção de choque de escape de nêutrons descrita por uma função analítica foi apresentada. Esta se baseia nas seções de choque parametrizadas, obtidas na primeira contribuição deste trabalho, no conceito de taxa de reação e na propriedade de *tracking* da simulação Monte Carlo físico. Com a pseudo-seção de choque, é possível tratar o escape em problemas de transporte de nêutrons da mesma forma que interações físicas são tratadas, seja aplicando esta em abordagens determinísticas ou estocásticas. Com respeito as parametrizações, funções analíticas descrevendo as seções de choque nucleares foram obtidas considerando um erro relativo médio em relação aos dados experimentais de apenas 2%, tornando o uso destas uma alternativa viável no estudo de transporte de nêutrons, principalmente pela fácil implementação e por não utilizar funções condicionais. Com as seções de choque parametrizadas, uma simulação do transporte de nêutrons em um meio finito específico foi realizada de tal forma que a pseudo-seção de choque de escape associada foi calculada através da metodologia proposta. Apesar da limitação computacional envolvida, que impossibilitou a obtenção de um maior detalhamento da influencia das ressonâncias na pseudo-seção de choque de escape, foi possível obter características gerais que demonstram a aplicabilidade desta em abordagens determinísticas e estocásticas, não somente fornecendo um maior detalhamento do escape de nêutrons de meios finitos, mas também facilitando e aprimorando os cálculos e simulações envolvendo o transporte de nêutrons em domínios finitos.

Palavras-chave: Seção de choque, Parametrizações; Monte Carlo; Pseudo-interação; Escape.

ABSTRACT

In the present work, two contributions in the study of neutron transport were made. The first refers to the parameterization of nuclear cross section through analytic functions composed of rational, polynomial and window functions. Since it is a nonlinear problem, the Levenberg-Marquardt algorithm was used in the optimization process. The second contribution refers to a novel approach in the study of neutron transport including escape from finite domains, such as nuclear reactor. For this, the derivation of a pseudo-cross section for neutron escape described by an analytic function was presented based on the nuclear cross section parameterizations, obtained in the first contribution of this work, on the reaction rate conception and finally on the tracking properties of physical Monte Carlo simulation. Thus, the pseudo-cross section allows to treat the neutron escape in neutron transport problems in the same way as physical interaction are treated, whether applying this in deterministic or stochastic approaches. With respect to the parameterizations, analytic functions describing the nuclear cross sections were obtained considering a mean relative error in relation to the experimental data of only 2%, making their use a viable alternative in dealing with neutron transport problems, meanly due to the easy implementation and for not uses conditional functions. By hand of the parameterized cross sections, a simulation of the neutron transport within a specific finite domain was performed in such a way that the associated pseudo-cross section for neutron escape was calculated using the proposed methodology. Apart from the computational limitations, which made it not possible to obtain the resonance influence in the pseudo-cross section in more details, it was possible to verify global characteristics that demonstrates it applicability in deterministic and stochastic approaches, not only providing greater details of neutron escape, but also simplifying and facilitating calculations and simulations involving the neutron transport in finite domains.

Keywords: Cross section; Parameterization; Monte Carlo; Pseudo-interaction; Escape.

ÍNDICE

1 INTRODUÇÃO 1

2 INTERAÇÃO DO NÊUTRON COM A MATÉRIA 5

2.1 Classificação das Interações 5

2.2 Seção de Choque 6

2.2.1 Definição de Seção de Choque 7

2.2.2 Forma Geral das Seções de Choque 10

2.2.3 Ressonâncias 12

2.3 Taxa de Reação 16

3 MÉTODO MONTE CARLO 20

3.1 Monte Carlo no Transporte de Nêutrons 20

3.2 Simulador Monte Carlo 21

4 OTIMIZAÇÃO 27

4.1 Método do Gradiente 29

4.2 Método de Gauss-Newton 31

4.3 Método de Levenberg-Marquardt 33

5 METODOLOGIA 35

5.1 Parametrização das Seções de Choque 35

5.1.1 Funções Polinomiais 35

5.1.2 Funções Racionais 36

5.1.3 Funções de Janela 39

5.1.4 Função final 41

5.2 Pseudo-Seção de Choque de Escape de Nêutrons 43

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES 49

6.1 Meio Multiplicativo Simulado 49

6.2 Parametrizações das Seções de Choque 50

6.3 Cálculo da Pseudo-Seção de Choque de Escape Para o Caso Específico . 57
6.4 Propriedades e Aplicações da Pseudo-Seção de Choque de Escape 64

7 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS 66

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 67

APÊNDICE A Erro Relativo das Parametrizações 72

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Seção de choque de espalhamento elástico do próton. 9
Figura 2.2 Seção de choque de espalhamento e de absorção do ^{238}U e suas características. 12
Figura 2.3 Ressonância do ^{238}U descrita pela fórmula de Breit-Wigner. 15

Figura 3.1 Fluxograma do passo Monte Carlo [Adaptado de Barcellos, 2021]. . 22
Figura 3.2 Fluxograma do processo de espalhamento [Adaptado de Barcellos, 2021]. 26

Figura 5.1 Região de baixa energia da seção de choque do ^{238}U. 36
Figura 5.2 Sobreposição de ressonâncias da seção de choque do ^{235}U. 37
Figura 5.3 Seção de choque microscópica de fissão do ^{235}U. 38
Figura 5.4 Funções de janela. 40
Figura 5.5 Função de janela vs Função condicional. 41
Figura 5.6 Interações de nêutrons em um domínio finito. 44

Figura 6.1 Fator de multiplicação efetivo por geração. 50
Figura 6.2 Parametrização das seções de choque do ^{1}H. 51
Figura 6.3 Parametrização das seções de choque do ^{16}O. 52
Figura 6.4 Parametrização das seções de choque do ^{235}U. 53
Figura 6.5 Parametrização das seções de choque do ^{238}U. 55
Figura 6.6 Fluxo espectral de nêutrons. 56
Figura 6.7 Seção de choque macroscópica total do meio. 57
Figura 6.8 Número de interações por unidade de volume ($n_{z_r}(\mathbf{r})$ e $n_{y_r}(\mathbf{r})$). . . 58
Figura 6.9 Número de interações por unidade de energia ($n_{z_E}(E)$ e $n_{y_E}(E)$). . 59
Figura 6.10 Limitação devido ao ΔE. 61
Figura 6.11 Aproximação da seção de choque macroscópica total do meio. . . . 62
Figura 6.12 Função densidade de probabilidade de escape. 63
Figura 6.13 Pseudo-seção de choque de escape em função da energia e da posição do nêutron. 64

Figura A.1 Erro relativo espalhamento elástico ^{1}H. 72

Figura A.2 Erro relativo captura radiativa ^{1}H. 72
Figura A.3 Erro relativo espalhamento elástico ^{16}O. 73
Figura A.4 Erro relativo captura radiativa ^{16}O. 73
Figura A.5 Erro relativo espalhamento elástico ^{235}U. 74
Figura A.6 Erro relativo captura radiativa ^{235}U. 74
Figura A.7 Erro relativo fissão ^{235}U. 75
Figura A.8 Erro relativo espalhamento elástico ^{238}U. 75
Figura A.9 Erro relativo captura radiativa ^{238}U. 76
Figura A.10 Erro relativo fissão ^{238}U. 76

LISTA DE TABELAS

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior
ENDF	*Evaluated Nuclear Data File*
PROMEC	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
^{1}H	Nuclídeo Hidrogênio-1
^{16}O	Nuclídeo Oxigênio-16
^{235}U	Nuclídeo Urânio-235
^{238}U	Nuclídeo Urânio-238

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A	Número de massa
A_s	Área, cm^2
C_i	Número de interações do tipo i
E	Energia, eV
E_R	Erro relativo
f	Função objetivo
F	Taxa de interação, s^{-1}
g	Fator estatístico
h	Constante de Planck, eVs
$\boldsymbol{h}$	Vetor incremento
$\boldsymbol{h_g}$	Vetor incremento no método do gradiente
$\boldsymbol{h_{lm}}$	Vetor incremento no método de Levenberg-Marquardt
$\boldsymbol{h_{gn}}$	Vetor incremento no método de Gauss-Newton
$\hbar$	Constante de Planck reduzida, eVs
I	Intensidade, $cm^{-2}s^{-1}$
$\boldsymbol{I}$	Matriz identidade
I_2	Densidade de intensidade com respeito à energia e à direção de movimento, $sr^{-1}MeV^{-1}cm^{-2}s^{-1}$
$\boldsymbol{J}$	Matriz jacobiana de $\boldsymbol{M}$
k_{eff}	Fator de multiplicação efetivo
L	Deslocamento total do nêutron, cm
m	Massa do nêutron, kg
M	Massa do núcleo alvo, kg
$\boldsymbol{M}$	Vetor imagem da função modelo
M_f	Função modelo
n_2	Densidade angular de nêutrons, $cm^{-3}sr^{-1}MeV^{-1}$
n_0	Densidade de nêutrons, cm^{-3}
n_{z_r}	Número de interações de escape por unidade de volume
n_{z_E}	Número de interações de escape por unidade de energia

n_{y_r}	Número de interações integrais por unidade de volume
n_{y_E}	Número de interações integrais por unidade de energia
N	Densidade de átomos, cm^{-3}
N_j	Densidade de núcleos da espécie j, cm^{-3}
N_i	Número de interações do tipo i por unidade de volume e de energia
N_y	Número de interações integrais por unidade de volume e de energia
N_z	Número de interações de escape por unidade de volume e de energia
p	Função polinomial
r	Função racional
$\mathbf{r}$	Vetor posição
R_0	Taxa de reação, $\mathrm{cm}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$
R_1	Densidade de taxa de reação com respeito à energia, $\mathrm{MeV}^{-1}\mathrm{cm}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$
R_{1_i}	Densidade de taxa de reação da interação i com respeito à energia, $\mathrm{MeV}^{-1}\mathrm{cm}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$
R_{1_y}	Densidade de taxa de reação integral com respeito à energia, $\mathrm{MeV}^{-1}\mathrm{cm}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$
R_{1_z}	Densidade de taxa de reação de escape com respeito à energia, $\mathrm{MeV}^{-1}\mathrm{cm}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$
R_2	Densidade de taxa de reação com respeito à energia e à direção de movimento, $\mathrm{sr}^{-1}\mathrm{MeV}^{-1}\mathrm{cm}^{-3}\mathrm{s}^{-1}$
S	Múltiplo do meio caminho livre
v	Velocidade, $^{cm}/_{s}$
w	Função de janela
$\boldsymbol{W}$	Matriz peso
$\boldsymbol{x}$	Vetor parâmetros
x_a	Valor aproximado obtido através das parametrizações
x_e	Valor observado
$\boldsymbol{y}$	Vetor dados observados
Z	Número de prótons

Símbolos Gregos

α	Ângulo no sistema esférico, rad
β	Ângulo no sistema esférico, rad

Γ	Largura total do nível de excitação, eV
Γ_f	Largura parcial do nível de excitação para decaimento via fissão, eV
Γ_i	Largura parcial do nível de excitação para decaimento via interação i, eV
Γ_n	Largura parcial do nível de excitação para decaimento via emissão de um nêutron, eV
Γ_γ	Largura parcial do nível de excitação para decaimento via emissão de um raio gama, eV
Δx	Espressura, cm
ζ	Desvio padrão
η	Escalar positivo para controlar o vetor incremento
θ	Ângulo no sistema esférico, rad
λ	Livre caminho médio, cm
λ_d	Constante de decaimento radioativo, s^{-1}
λ_{dB}	Comprimento de onda de de Broglie, cm
$\lambda\!\!\!^{-}_{dB}$	Comprimento de onda de de Broglie normalizado, cm
μ	Massa reduzida, kg
ν	Número médio de nêutrons nascidos da fissão
ξ	Fator de amortecimento
σ	Seção de choque microscópica, cm^2
σ_f	Seção de choque microscópica de fissão, barns
σ_i	Seção de choque microscópica da interação i, barns
σ_{ne}	Seção de choque microscópica de espalhamento elástico, barns
σ_{ni}	Seção de choque microscópica de espalhamento inelástico, barns
σ_p	Seção de choque microscópica devido ao mecanismo de espalhamento potencial, barns
σ_s	Seção de choque microscópica de espalhamento, barns
σ_t	Seção de choque microscópica total, barns
σ_{t_j}	Seção de choque microsópica total da espécie j, barns
σ_γ	Seção de choque microscópica de captura radiativa, barns
Σ_i	Seção de choque macroscópica da interação i, cm^{-1}

Σ_t	Seção de choque macroscópica total, cm^{-1}
Σ_{t_j}	Seção de choque macroscópica total da espécie j, cm^{-1}
Σ_y	Seção de choque macroscópica integral, cm^{-1}
Σ_z	Pseudo-seção de choque macroscópica de escape, cm^{-1}
τ	Tempo médio de vida, s
ϕ_1	Fluxo espectral de nêutrons, $\mathrm{MeV}^{-1}\mathrm{cm}^{-2}\mathrm{s}^{-1}$
ϕ_2	Fluxo angular de nêutrons, $\mathrm{sr}^{-1}\mathrm{MeV}^{-1}\mathrm{cm}^{-2}\mathrm{s}^{-1}$
Φ	Ângulo no sistema esférico, rad
χ	Espectro de fissão imediata
χ^2	Soma do quadrado dos resíduos ponderados
ψ	Ângulo no sistema esférico, rad
$\mathbf{\Omega}$	Vetor unitário na direção de movimento

1 INTRODUÇÃO

Problemas envolvendo o transporte de partículas neutras se tornaram bastante explorados a partir dos anos 50, principalmente com o desenvolvimento das primeiras armas nucleares durante a segunda guerra mundial. Atualmente, as aplicações deste fenômeno possuem fins mais pacifistas, como por exemplo, o uso de reatores nucleares para geração de energia elétrica, aplicações medicinais, desenvolvimento e caracterização de novos materiais, entre outros.

Matematicamente, o transporte de nêutrons em determinado meio, como em um reator nuclear, é modelado por uma lei, denominada equação de Boltzmann, cuja solução fornece a distribuição de nêutrons no espaço, na energia e no tempo, governando a física no sistema. A distribuição por sua vez está diretamente relacionada com as interações dos nêutrons no meio, sendo que estas interações são quantificadas e incorporadas na equação por meio do conceito de seção de choque nuclear. Atualmente, as seções de choque podem ser obtidas em bibliotecas de dados nucleares, como a *Evaluated Nuclear Data File* (ENDF) [Brown et al., 2018; Duderstadt e Martin, 1979; Bell e Glasstone, 1970].

Existem basicamente dois métodos com princípios fundamentalmente distintos para lidar com esta equação, são os denominados métodos determinísticos e métodos estocásticos. Em relação aos métodos determinísticos, estes lidam diretamente com a equação de Boltzmann, buscando uma solução que represente o fluxo de nêutrons no meio em questão. Porém, o espaço de fase desta equação possui sete dimensões (posição, direção de movimento, energia e tempo) e é de difícil tratamento matemático, de modo que simplificações são necessárias, sejam elas diminuindo o número de variáveis independentes que compõem o espaço de fase ou as discretizando, como é o caso das aproximações P_n e S_n [Sjenitzer, 2013].

Uma limitação que pode aparecer na discretização das variáveis na equação de Boltzmann é que esta implique em um sistema com um número muito grande de equações algébricas, principalmente quando todas as sete variáveis independentes são consideradas. Destaca-se ainda que as distribuições obtidas por meio da equação de Boltzmann representam um valor médio, ou seja, as flutuações devido aos processos aleatórios envolvidos no transporte de nêutrons não são, a priori, levadas me conta. Apesar disso, as flutuações envolvidas na maioria dos problemas, e que geralmente incluem reatores nucleares, são

pequenas em comparação com os valores médios obtidos [Larsen, 2006; Bell e Glasstone, 1970].

Como mencionado, o transporte de nêutrons é, por natureza, regido através de processos aleatórios de tal forma que a história de um nêutron individual é caracterizada por uma sequência de eventos aleatórios e uma vez que a equação de Boltzmann não considera esta aleatoriedade, a sua solução não fornece o comportamento físico de uma única partícula isolada.

Por outro lado, métodos estocásticos como o de Monte Carlo físico são caracterizados por levar em conta os aspectos aleatórios no transporte de partículas neutras. Neste, a história de cada nêutron individual dentro do domínio é simulada com base nos processos físicos microscópicos envolvidos no decorrer de sua trajetória. Simulando um número suficientemente grande de histórias de nêutrons é possível obter parâmetros e informações globais envolvidos no problema, como por exemplo, a distribuição dos nêutrons no sistema [Larsen, 2006].

Além de poder predizer as características aleatórias do processo, o método de Monte Carlo físico é aconselhável por convergir mais rapidamente em problemas envolvendo dimensões elevadas, como é o caso do transporte de nêutrons, já que, conforme abordado, sete dimensões estão envolvidas nestes problemas quando não são impostas hipóteses simplificativas. Em contra partida, a utilização do método não é vantajosa para problemas envolvendo poucas dimensões, além de que em casos complexos, de acordo com Larsen, 2006, o número de histórias necessárias para a obtenção de resultados satisfatórios pode ser bastante elevado, de modo que a utilização do método se torne inviável [de Camargo, 2011].

Em relação ao uso do método de Monte Carlo físico no transporte de partículas neutras, é possível encontrar na literatura diversos simuladores que utilizam tal abordagem (GEANT [Agostinelli et al., 2003], TRIPOLI [Brun et al., 2015], MCNP [Jeong et al., 2015], Serpent [Leppänen et al., 2015], KENO [Petrie e Cross, 1975], MCBEND [Richards et al., 2015], OpenMC [Romano et al., 2015] e outros), sendo que nestes as seções de choque necessárias para as simulações são obtidas por meio de interpolações realizadas diretamente nos bancos de dados nucleares.

Por outro lado, destaca-se o simulador desenvolvido em linguagem C++ pelo Grupo de Estudos Nucleares, na Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio

Grande do Sul. Criado por de Camargo, 2011 e aperfeiçoado em de Camargo et al., 2013, Barcellos et al., 2015 e Barcellos et al., 2021b, este simulador de transporte de nêutrons, que utiliza o método Monte Carlo físico, considera as seções de choque como funções contínuas no espectro energético, obtidas a partir da interpolação linear dos dados disponíveis nas bibliotecas nucleares, de modo que estas funções são implementadas no código do simulador, diminuindo assim o custo computacional envolvido quando comparado com os demais que determinam as seções de choque diretamente na base de dados.

Apesar de utilizar funções contínuas, estas são condicionais. Deste modo, uma primeira contribuição deste trabalho é enriquecer o simulador destacado acima através da implementação das seções de choque parametrizadas por meio de funções analíticas, obtidas em um processo de otimização não linear através do algoritmo de Levenberg-Marquardt. Este tipo de função, além de não depender de decisões computacionais, é também utilizado por possuir diversas propriedades interessantes e desejáveis que permitem e facilitam a manipulação das seções de choque em outras abordagens, como por exemplo, na validação da equação de Boltzmann, onde é necessário avaliar a integral destas [Conway, 1978].

Voltando aos métodos que tratam do transporte de nêutrons, uma diferença interessante entre as abordagens determinísticas e estocásticas se refere ao tratamento do escape de nêutrons de domínios finitos. Para métodos determinísticos, o fluxo ou o escape de nêutrons nas superfícies do domínio deve ser conhecido já que este parâmetro é utilizado como condição de contorno para a obtenção da solução da equação de Boltzmann. Geralmente, adota-se que tal fluxo é nulo nas superfícies ou próximo destas, nas conhecidas distâncias de extrapolação [Oliveira et al., 2019; Tumelero et al., 2019; Fernandes et al., 2017; Oliveira et al., 2017].

Esta aproximação, embora forneça resultados satisfatórios, não condiz exatamente com a realidade. Por outro lado, a aplicação do método Monte Carlo físico no estudo do transporte de nêutrons em domínios finitos, como em reatores nucleares, não demanda o conhecimento prévio do fluxo de nêutrons nas superfícies e permite analisar e contabilizar o escape de nêutrons nestas de forma precisa, de acordo com a física do problema [Barcellos et al., 2021a].

Com isto, a segunda contribuição deste trabalho consiste em utilizar as propriedades do método Monte Carlo físico para desenvolver uma nova abordagem para o tra-

tamento de problemas de transporte de nêutrons envolvendo o escape destes em meios finitos. A ideia geral é utilizar a propriedade de *tracking* do método Monte Carlo físico, ou seja, utilizar o fato de que com o método é possível acompanhar toda a história de cada nêutron individualmente conforme este viaja através do espaço, juntamente com as seções de choque parametrizadas via funções analíticas e o conceito de taxa de reação, para desenvolver uma metodologia para a obtenção de uma pseudo-seção de choque de escape de nêutrons descrita por uma função analítica, visando assim futuras aplicações que simplificam técnicas analíticas e numéricas no tratamento de problemas com contornos finitos.

Para tal, a presente dissertação está organizada da seguinte forma: No capítulo 2 será abordada de forma mais formal a interação de nêutrons com a matéria, apresentando os conceitos relacionados com este fenômeno. No capítulo 3, o método Monte Carlo e o simulador utilizado na presente dissertação são descritos com maiores detalhes. O processo de otimização não linear utilizado no trabalho será abordado no capítulo 4. No capítulo 5, as metodologias utilizadas na parametrização das seções de choque e na obtenção da pseudo-seção de choque de escape serão apresentadas. A acurácia das parametrizações e a obtenção da pseudo-seção de choque de escape para um caso específico, bem como suas propriedades, serão abordados no capítulo 6. Finalmente, o sétimo capítulo consiste nas conclusões e trabalhos futuros.

2 INTERAÇÃO DO NÊUTRON COM A MATÉRIA

Nesta seção, a interação de nêutrons com a matéria será abordada em maiores detalhes, para isto, uma classificação dos tipos de interações possíveis, bem como os conceitos de seção de choque e taxa de reação, fundamentais no estudo de transporte de nêutrons, serão definidos.

Cabe destacar que as interações do nêutron com a matéria são governadas por três mecanismos distintos, conhecidos como formação de núcleo composto, espalhamento potencial e interação direta. Geralmente, em reatores nucleares, os três mecanismos estão envolvidos, porém os dois primeiros são dominantes pois o mecanismo de interação direta é caracterizado por uma interação que ocorre entre o nêutron incidente e apenas alguns núcleons que formam o núcleo alvo, e isso só ocorre para nêutrons com energias maiores do que as usualmente encontradas nestes reatores [Shultis e Faw, 2002; Lamarsh, 1966].

2.1 Classificação das Interações

Governadas pelos três mecanismos citados acima, é possível classificar a maneira com que um nêutron interage com a matéria em dois grandes grupos, o primeiro grupo engloba as interações de espalhamento e o segundo grupo as interações de absorção [Shultis e Faw, 2002; Lamarsh, 1966; Meghreblian e Holmes, 1960].

- Espalhamento: O espalhamento se refere a toda reação entre um nêutron e um núcleo tal que os produtos são o próprio núcleo e um nêutron que não necessariamente é o incidente, podendo estes sofrerem alterações em sua energia interna e/ou cinética. Existem dois processos principais que compõem este tipo de interação. O *espalhamento elástico* (n, n) que é caracterizado por uma reação em que os produtos desta são o núcleo alvo em seu estado de energia interna inicial, ou seja, sua energia interna não varia na colisão, e um nêutron. O outro processo se refere ao *espalhamento inelástico* (n, n^*) que é caracterizado por uma reação cujos produtos são o núcleo alvo em um estado de energia interna diferente que o inicial e um nêutron, ou seja, o que diferencia o espalhamento elástico e inelástico é o estado de energia interna do núcleo atingido pelo nêutron, não importando a energia que o próprio nêutron possui após a colisão.

- Absorção: A absorção engloba todas as reações entre um nêutron e um núcleo alvo cujos produtos não contém o núcleo original ou um nêutron. Assim como no espalhamento, existem dois processos principais que compõem este tipo de interação. O primeiro é denominado de *captura de nêutrons*, que inclui todas as interações que não produzem fissão, tais como a captura radiativa (n, γ), reações que produzem partículas carregadas, como (n, α) e (n, p), e etc. O outro processo que compõe a absorção é a *fissão* (n, f), que consiste na quebra de um núcleo pesado em dois mais leves e liberação de energia.

Em reatores nucleares, por exemplo, as reações de fissão são as principais responsáveis pela liberação de energia térmica útil. Além disso, através de sucessivas interações de espalhamento, principalmente elástico, os nêutrons rápidos que possuem elevada energia cinética são moderados até que atinjam o regime térmico, processo fundamental em reatores nucleares térmicos, uma vez que são os nêutrons neste regime de energia que provocam a fissão nuclear. Outro processo de interação bastante presente e importante em reatores é o de captura radiativa, pois esta reação permite a produção de radioisótopos a partir de núcleos alvos estáveis [Reuss, 2008; Shultis e Faw, 2002]

Sendo assim, em problemas de transporte de nêutrons, é necessário quantificar estas maneiras de interações entre nêutrons e núcleos alvos que compõem o meio. Conforme Lamarsh, 1966, esta quantificação pode ser feita com base em um conceito chamado de seção de choque.

2.2 Seção de Choque

O conceito de seção de choque está diretamente relacionado com a probabilidade de que uma interação entre um nêutron e a matéria ocorra. Na prática, a seção de choque pode ser microscópica, quando esta é uma característica de um único núcleo alvo, ou macroscópica, quando esta é uma característica de um material contendo um número maior de núcleos alvo [Reuss, 2008]. Os dados das seções de choque obtidos experimentalmente e disponíveis em bibliotecas de dados nucleares se referem à seção de choque microscópica, desta forma, cada nuclídeo existente possui uma seção de choque microscópica associada a cada tipo de interação [Brown et al., 2018].

2.2.1 Definição de Seção de Choque

É possível definir o conceito de seção de choque, seja microscópico ou macroscópico, a partir de argumentos puramente geométricos, de argumentos puramente probabilísticos ou ainda a partir de argumentos fenomenológicos, conforme apresentado por diversos autores [Reuss, 2008; Shultis e Faw, 2002; Meyerhof, 1967; Lamarsh, 1966; Meghreblian e Holmes, 1960].

Como será abordado e detalhado no próximo capítulo, o estudo do transporte de nêutrons neste trabalho foi realizado por meio do método de Monte Carlo físico, sendo que este reproduz um experimento laboratorial e pode ser tratado como tal. Desta forma, visando elaborar o conceito de seção de choque microscópica a partir de argumentos fenomenológicos, considere uma placa fina alvo de área superficial A_s e espessura Δx, contendo N átomos de um único elemento químico por unidade de volume distribuídos uniformemente ao longo da placa. Considere ainda um feixe uniforme de nêutrons monoenergéticos com intensidade I incidindo perpendicularmente na área A_s do alvo.

Observa-se experimentalmente que a taxa de interação F entre os nêutrons do feixe e os núcleos que formam a placa é proporcional à intensidade do feixe, à densidade atômica, à área e à espessura da placa. Esta observação pode ser resumida conforme a Equação 2.1.

$$F = \sigma I N A_s \Delta x \tag{2.1}$$

Onde σ representa a constante de proporcionalidade, definida como seção de choque microscópica. Note que isolando a seção de choque, obtém-se

$$\sigma = \frac{F}{I N A_s \Delta x} \tag{2.2}$$

Como o produto $N A_s \Delta x$ na fração da Equação 2.2 representa o número total de átomos (ou núcleos) na placa alvo, σ se torna, por definição, a taxa de interação por núcleo do alvo por unidade de intensidade do feixe de nêutrons incidente. Disto observa-se a característica microscópica da seção de choque microscópica.

Note ainda que a intensidade do feixe é, por definição, o número de nêutrons que incidem na placa por unidade de área e por unidade de tempo. Desta forma, $I A_s$ nêutrons atingem a placa alvo por segundo, enquanto que, conforme Equação 2.1, $\sigma I N A_s \Delta x$ inte-

ragem nesta. Ou seja, a probabilidade relativa de um nêutron qualquer do feixe interagir com um núcleo que forma a placa fina é

$$\frac{\sigma I N A_s \Delta x}{I A_s} = \left(\frac{\sigma}{A_s}\right) N A_s \Delta x \tag{2.3}$$

Uma vez que o produto $NA_s\Delta x$ é o número de núcleos na placa alvo, $\frac{\sigma}{A_s}$ é a probabilidade de um nêutron interagir em um núcleo específico da placa, ou seja, é a probabilidade por núcleo alvo de um nêutron do feixe incidindo na placa interagir. Como a área da placa é fixa no experimento, o próprio termo σ determina a probabilidade de uma interação na placa alvo. É neste sentido que a seção de choque está relacionada com a probabilidade de interação.

Na Equação 2.1, nenhuma restrição em relação ao tipo de interação foi imposta, ou seja, no raciocínio acima, qualquer tipo de interação entre as classificadas na seção anterior foi considerada. Neste caso, denomina-se a seção de choque como seção de choque microscópica total e é designada por σ_t.

Restringindo a mesma análise para uma interação específica, obtém-se a respectiva seção de choque microscópica. Desta forma, por definição tem-se

$$\sigma_t = \sigma_{ne} + \sigma_{ni} + \sigma_f + \sigma_\gamma + \cdots \tag{2.4}$$

Onde σ_{ne}, σ_{ni}, σ_f, σ_γ representam as seções de choque de espalhamento elástico, espalhamento inelástico, fissão e de captura radiativa, respectivamente. Os "$\cdots$"representam os outros tipos de interação, conforme abordado na seção 2.1.

Uma análise dimensional na Equação 2.2 permite concluir que a seção de choque microscópica possui dimensões de área, sendo geralmente medida em unidades de *barn* (b), onde $1b = 10^{-24}\ cm^2$. Na argumentação fenomenológica dada acima, o feixe de nêutrons é monoenergético, de modo que a seção de choque microscópica é uma constante. Na prática, observa-se que esta constante assume diferentes valores conforme a intensidade do feixe, ou energia cinética dos nêutrons, varia, como ilustrado na Figura 2.1, que representa a seção de choque microscópica de espalhamento elástico do próton.

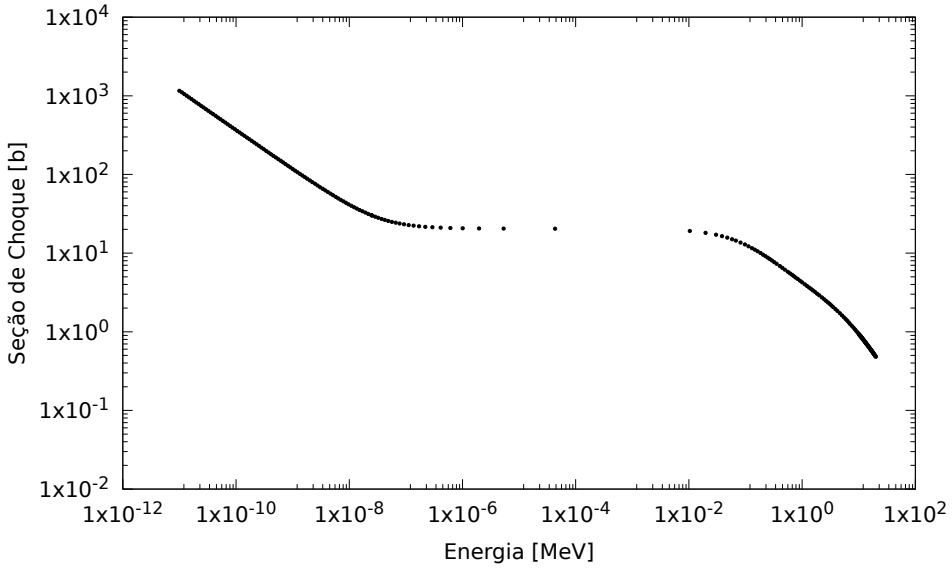


Figura 2.1 – Seção de choque de espalhamento elástico do próton.

Conforme exposto anteriormente, a seção de choque pode ser microscópica ou macroscópica. Utilizando o mesmo experimento e considerando uma interação qualquer i, a seção de choque macroscópica pode ser obtida diretamente a partir da seção de choque microscópica por

$$\Sigma_i = N\sigma_i \tag{2.5}$$

Onde Σ_i representa a seção de choque macroscópica e σ_i a seção de choque microscópica da interação i. No caso de Σ_i, todos os núcleos que formam a placa alvo são levados em conta, o que caracteriza a seção de choque macroscópica. Da equação acima, é evidente que a seção de choque macroscópica tem dimensão de $[L]^{-1}$, onde L representa uma unidade de medida de comprimento.

A seção de choque macroscópica pode ser interpretada como a probabilidade de um nêutron interagir por unidade de comprimento de percurso. Além disso, é fácil mostrar que o inverso da seção de choque macroscópica total do meio corresponde ao livre caminho médio dos nêutrons neste, ou seja, a distância média que um nêutron percorre até interagir [Reuss, 2008] é dada por

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma_t} \tag{2.6}$$

Conforme citado na introdução do experimento, a densidade de núcleos N con-

siderada até o momento é composta por um único elemento químico, porém, é possível generalizar o conceito de seção de choque para misturas contendo diferentes espécies químicas. De acordo com Reuss, 2008 e Lamarsh, 1966, a seção de choque macroscópica de determinada interação da mistura que compõem o meio é a soma das seções de choque macroscópicas da respectiva interação de cada componente.

Desta forma, considere uma mistura contendo k componentes, sendo que N_j, com $1 \leq j \leq k$, representa a densidade de núcleos da espécie j. Diante do exposto, a probabilidade por unidade de distância de uma interação qualquer entre um nêutron e um núcleo da espécie j ocorrer será o produto entre a densidade de núcleos e a seção de choque microscópica total da respectiva espécie, ou seja, $\Sigma_{t_j} = N_j \sigma_{t_j}$. Logo a seção de choque macroscópica total do meio será

$$\Sigma_t = \sum_{j=1}^{k} \Sigma_{t_j} = \sum_{j=1}^{k} N_j \sigma_{t_j} \tag{2.7}$$

A mesma ideia pode ser estendida para qualquer tipo de interação.e

2.2.2 Forma Geral das Seções de Choque

Conforme abordado anteriormente, as seções de choque microscópica, e consequentemente macroscópica, dependem da energia do nêutron, sendo que a forma desta dependência varia entre os possíveis nuclídeos e o tipo de interação. De forma resumida, os parágrafos a seguir descrevem as características desta dependência.

Antes de descrever a forma geral das seções de choque, destaca-se que de acordo com Reuss, 2008, assim como qualquer objeto, os nêutrons possuem um comprimento de onda de De Broglie associado dado por

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{mv} = \frac{2.86 \times 10^{-11}}{\sqrt{E}} \tag{2.8}$$

Onde λ_{dB} é o comprimento de onda associado ao nêutron, h é a constante de Planck, m é a massa do nêutron, v é a velocidade do nêutron e E é a energia do nêutron em eV. Nesta equação e em todo o decorrer do trabalho, os efeitos relativísticos são desprezados, uma vez que as energias envolvidas no presente estudo não são altas o suficientes para que estes se tornem mensuráveis.

Da Equação 2.8, observa-se que para nêutrons rápidos ($E > 1\ keV$), o comprimento

de onda de De Broglie é da ordem do tamanho de um núcleo, por exemplo, para nêutrons com 0.5 MeV, tem-se que $\lambda_{dB} = 4.04 \times 10^{-12}\ cm$, porém, para nêutrons térmicos ($E < 1$ eV), o comprimento de onda de De Broglie é da ordem do tamanho de um átomo, por exemplo, para nêutrons com 0.075 eV, tem-se que $\lambda_{dB} = 1.04 \times 10^{-8}\ cm$.

Como consequência disto, em geral, os nêutrons com baixas energias acabam influenciando uma maior região do espaço quando comparados aos nêutrons de energias mais elevadas. Desta forma, devido ao maior alcance no espaço, a probabilidade de ocorrer uma interação com a matéria, e consequentemente a seção de choque, será maior para nêutrons com energias mais baixas.

Conforme Reuss, 2008, as ordens de magnitude das seções de choque de interações de absorção variam bastante entre os diferentes nuclídeos. Porém, observa-se que nêutrons na região térmica variam seguindo um comportamento inversamente proporcional à raiz quadrada da energia cinética do nêutron, ou seja, apresenta um comportamento do tipo $\frac{1}{\sqrt{E}}$. Por outro lado, para nêutrons com energia cinética na região epitérmica, isto é, entre a região térmica e a região rápida do espectro energético, a seção de choque geralmente apresenta um comportamento muito mais complexo, com picos, conhecidos como ressonâncias, que variam significativamente entre os diferentes nuclídeos.

Em relação as seções de choque das interações de espalhamento, estas podem apresentar ressonâncias principalmente para nuclídeos pesados ou intermediários, porém, seu comportamento médio é constante no espectro energético e da ordem de alguns *barns*, com exceção de interações envolvendo nêutrons com energias muito baixas, pois como citado, o comprimento de onda de De Broglie neste caso é relativamente grande, o que implica em efeitos de interferência na própria molécula que contém o núcleo alvo da interação de espalhamento. Este fato se reflete em um aumento significativo das seções de choque para estas energia. [Lamarsh, 1966].

Na Figura 2.2, que ilustra as seções de choque de captura radiativa e de espalhamento elástico do isótopo de urânio ^{238}U obtidas no banco de dados nucleares ENDF/B-VIII [Brown et al., 2018], é possível observar as características citadas acima.

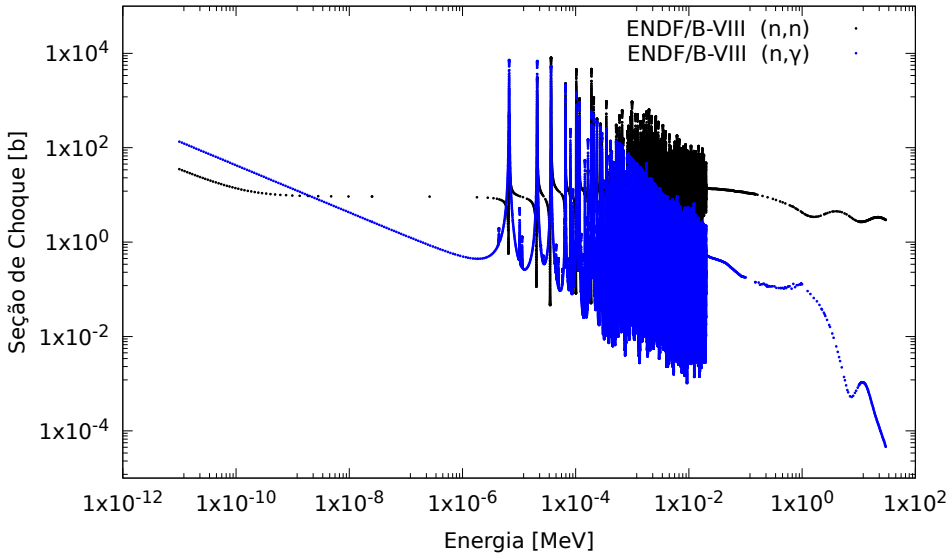


Figura 2.2 – Seção de choque de espalhamento e de absorção do ^{238}U e suas características.

2.2.3 Ressonâncias

Com relação às ressonâncias presentes nas seções de choque, conforme Lamarsh, 1966, a grande maioria destas podem ser explicadas por meio do mecanismo de interação de formação de um núcleo composto, sendo que o mecanismo de espalhamento potencial influencia nos valores da seção de choque nas respectivas ressonâncias, mas não na forma destas.

De forma resumida, quando um nêutron incide em um núcleo Z^A, onde Z representa o número de prótons e A representa o número de massa do isótopo, este é absorvido pelo núcleo formando assim um núcleo composto Z^{A+1} em estado excitado, que decairá logo em seguida, seja pela emissão de outro nêutron (pode ser o mesmo nêutron incidente), pela emissão de partículas γ ou outra forma de decaimento. Destaca-se que o tempo médio para que um núcleo em estado de excitação decaia depende da constante de decaimento de estado excitado Γ, mais conhecida como largura total do nível de excitação e que é definida por

$$\Gamma = \hbar\lambda_d = \frac{\hbar}{\tau} \tag{2.9}$$

Onde τ é o tempo médio de vida do núcleo composto formado na absorção do nêutron,

ou seja, a inversa da constante de decaimento radioativo λ_d, e $\hbar$ é a constante reduzida de Planck.

Como existem diversas formas do núcleo composto decair, a constante de decaimento de estado excitado pode ser escrita como a soma destas formas, semelhante a soma das seções de choque parciais de cada tipo de interação para formar a seção de choque total. Sendo assim, Γ pode ser reescrito como

$$\Gamma = \Gamma_n + \Gamma_\gamma + \Gamma_f + \cdots \tag{2.10}$$

Onde Γ_n representa a largura parcial do nível de excitação (*partial level width*) para o decaimento do núcleo composto através da emissão de um nêutron (isto caracteriza uma interação de espalhamento), Γ_γ representa a largura parcial do nível de excitação para o decaimento através da emissão de um raio γ, Γ_f o decaimento através da fissão e "$\cdots$"os outros tipo de decaimento possíveis.

Através da mecânica quântica, é possível mostrar que a probabilidade de formação de um núcleo composto, ou seja, a probabilidade de absorção do nêutron incidente pelo isótopo Z^A aumenta consideravelmente quando a energia cinética do nêutron incidente, somada ao aumento da energia de ligação do núcleo composto Z^{A+1} devido a absorção do nêutron extra, é igual ou próxima a energia correspondente a algum nível de excitação do núcleo composto Z^{A+1}.

Este aumento na probabilidade de absorção se reflete, obviamente, em um aumento nas seções de choque e é o que forma as ressonâncias observadas nestas. É interessante destacar que a constante Γ possui uma interpretação geométrica nas seções de choque, caracterizando a largura, no espectro energético, da ressonância. Vale notar que a absorção do nêutron na formação do núcleo composto não implica necessariamente em uma interação de absorção como definida na seção 2.1, pois um nêutron pode ser emitido de maneira quase instantânea após a formação do núcleo, caracterizando uma interação de espalhamento, desta forma, o mecanismo explica as ressonâncias das seções de choque de qualquer tipo de interação.

Em geral, o número de ressonâncias aumenta para núcleos mais pesados, uma vez que estes possuem um número maior de níveis de energia de excitação. Além disso, estes níveis são, geralmente, mais esparsos para energias mais baixas, o que explica o intervalo de energia maior entre as ressonâncias considerando menores energias no espectro das

seções de choque, como pode ser observado na Figura 2.2.

De acordo com Reuss, 2008, é possível descrever matematicamente as ressonâncias individuais através de distribuições conhecidas como ressonâncias de Breit-Wigner. Como o perfil das ressonâncias varia com o tipo de interação, as ressonâncias de Breit-Wigner podem ser utilizadas tanto para descrever as ressonâncias presentes nas seções de choque das interações de absorção, como captura radiativa e fissão, quanto para descrever as ressonâncias presentes nas interações de espalhamento, como espalhamento elástico e inelástico. Além disto, uma derivação destas distribuições a partir do formalismo quântico pode ser encontrado com maiores detalhes em Meyerhof, 1967.

Conforme visto na seção anterior, as ressonâncias são dominantes nas regiões epitérmicas das seções de choque, mais especificamente nas regiões mais baixas do domínio epitérmico, apesar de existirem algumas para energias mais elevadas. Para estas regiões de energia, o momento angular orbital dos nêutrons é nulo e por esta razão, as equações de Breit-Wigner descritas abaixo consideram apenas a *s-wave*, de modo que as ondas que caracterizam nêutrons com energias mais elevadas, como *p-wave* e *d-wave*, são desprezadas [Reuss, 2008].

Para seções de choque de absorção, a fórmula de Breit-Wigner descrevendo as ressonâncias é dada por

$$\sigma_i = \pi \lambda_{dB}^2 g \frac{\Gamma_n \Gamma_i}{\left(E - E_0\right)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} \tag{2.11}$$

Sendo que Γ_i representa a largura parcial do nível de excitação da interação i. Neste caso, i representa qualquer interação de absorção conforme definida na subseção 2.1, como por exemplo, a fissão nuclear ou a captura radiativa.

Para seções de choque de espalhamento, a fórmula de Breit-Wigner descrevendo as ressonâncias é dada por

$$\sigma_s = \pi \lambda_{dB}^2 g \frac{\Gamma_n^2}{\left(E - E_0\right)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + 2\sqrt{\pi \lambda_{dB}^2 g \sigma_p} \frac{\Gamma_n \left(E - E_0\right)}{\left(E - E_0\right)^2 + \frac{\Gamma^2}{4}} + \sigma_p \tag{2.12}$$

Nas equações acima, λ_{dB} é o comprimento de onda normalizado, ou seja, $\lambda_{dB} = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu E_0}}$, onde μ é a massa reduzida considerando o nêutron incidente e o núcleo alvo, E_0 é a energia no espectro energético da seção de choque que corresponde ao valor máximo desta na respectiva ressonância e o parâmetro g é um fator estatístico, que depende do momento

angular intrínseco dos núcleos, também conhecido por *spin*. Finalmente, σ_p corresponde a influência do mecanismo de interação de espalhamento potencial na seção de choque, e é constante sobre o intervalo de energia da ressonância, sendo que, conforme já exposto, este não altera a forma da ressonância, apenas a integral desta.

Por exemplo, na Figura 2.3, a primeira ressonância da seção de choque total do isótopo de urânio ^{238}U é ilustrada, sendo que esta foi obtida através da Equação 2.11, uma vez que a respectiva ressonância é característica da seção de choque de captura radiativa do nuclídeo. Os parâmetros necessários e aplicados na respectiva equação são: $h = 6.582119 \times 10^{-16}\ eVs$, $g = 1$, $\mu = 1.66792053042489 \times 10^{-27}\ kg$, $E_0 = 6.674\ eV$, $\Gamma_n = 0.001493\ eV$, $\Gamma_\gamma = 0.023\ eV$.

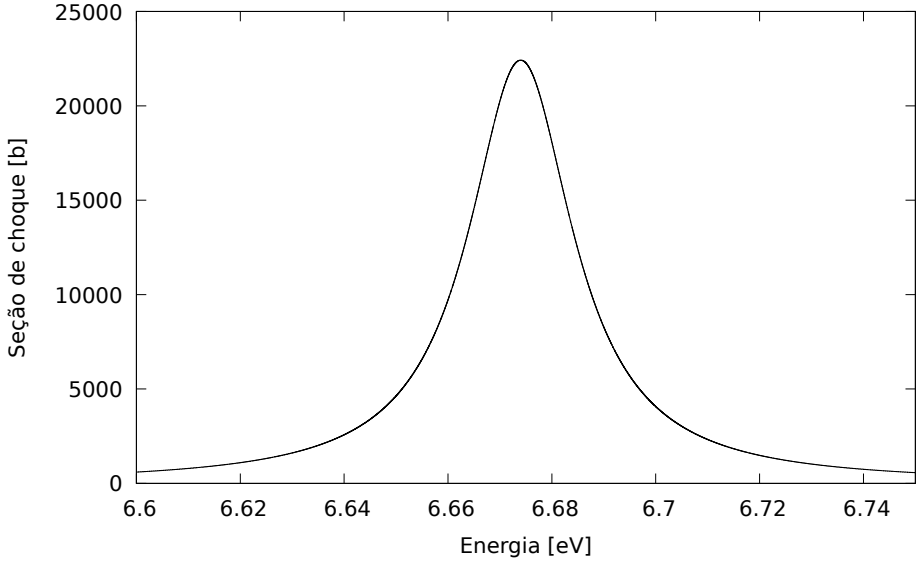


Figura 2.3 – Ressonância do ^{238}U descrita pela fórmula de Breit-Wigner.

Aqui uma observação deve ser feita, a forma das ressonâncias depende também da temperatura do ambiente em que o núcleo alvo pertence, ou seja, da energia cinética do próprio alvo. As fórmulas de Breit-Wigner como introduzidas acima consideram que o núcleo alvo está em repouso no sistema laboratório, isso implica que os perfis obtidos através destas são válidos para uma situação onde, hipoteticamente, a temperatura do ambiente é zero K [Lamarsh, 1966].

É evidente que isto não é o que ocorre em situações reais, sendo assim, um efeito conhecido como efeito Doppler nuclear deve ser levado em conta ao modelar as ressonâncias matematicamente, sendo que é possível inserir este efeito nas fórmulas de Breit-Wigner

[Lamarsh, 1966]. Geralmente, os dados de seções de choque fornecidos nas bibliotecas nucleares consideram uma temperatura ambiente de 293 K [Brown et al., 2018], por isso a curva da ressonância da Figura 2.3 não ajustaria precisamente a primeira ressonância do nuclídeo ^{238}U como ilustrado na Figura 2.2.

Apesar disto, a Equação 2.11 e a Equação 2.12 fornecem caracteríticas qualitativas suficientes para o propósito deste trabalho. Destaca-se que atualmente nenhuma formulação matemática descreve toda a estrutura de ressonâncias das seções de choque, apenas picos isolados, como discutido acima. Apesar disto, alguns aspectos estatísticos, como distância entre as ressonâncias, larguras entre ressonâncias, entre outros, podem ser encontrados em Reuss, 2008.

Uma vez introduzida a ideia de seção de choque e suas características, é possível abordar o conceito de taxa de reação, que é fundamental no desenvolvimento deste trabalho.

2.3 Taxa de Reação

A taxa com que nêutrons interagem em qualquer meio é descrita por meio do conceito de taxa de reação, sendo que esta possui uma relação direta com as seções de choque já discutidas. Conforme Lamarsh, 1966, de modo geral, a taxa de reação R fornece o número de interações por unidade de volume e por unidade de tempo em determinado ponto do espaço.

De maneira mais formal, a taxa de reação pode ser introduzida com base no conceito de densidade [Bell e Glasstone, 1970; Lamarsh, 1966]. Antes de apresentar esta formalização, atenta-se para o fato de que no restante do trabalho, subíndices variando de 0 a 2 foram utilizados para indicar diferentes funções de densidade da mesma grandeza, sendo que o subíndice 2 representa a densidade de determinada grandeza com respeito a energia e ao ângulo sólido, 1 representa a densidade de uma grandeza com respeito a energia e o subíndice 0 é utilizado para descrever uma grandeza quando esta não é uma função de densidade com respeito a energia e ao ângulo sólido.

Com isto, seja $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ uma função distribuição de densidade, conhecida como densidade angular de nêutrons, que representa o número de nêutrons por unidade de volume, por unidade de energia e por unidade de ângulo sólido, em $\mathbf{r}$, com energia E, com direção $\mathbf{\Omega}$ e em t.

Esta função é definida de tal forma que $n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE$ representa o número de nêutrons por unidade de volume no ponto $\mathbf{r}$ do espaço e no instante t do tempo, levando em conta nêutrons com energia no intervalo infinitesimal dE ao redor de E e com vetores de velocidade limitados dentro do ângulo sólido infinitesimal $d\mathbf{\Omega}$ ao redor de $\mathbf{\Omega}$.

Sendo assim, considerando nêutrons com qualquer energia e qualquer direção de movimento possível, o número de nêutrons por unidade de volume no ponto $\mathbf{r}$ e em t será

$$n_0(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty \int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE \tag{2.13}$$

Voltando aos conceitos experimentais introduzidos na seção 2.2, é possível verificar a partir da Equação 2.1, por inspeção, que a taxa de reação R considerando qualquer tipo de interação na placa alvo será $R = I\Sigma_t = nv\Sigma_t$[1]. Naquele caso, o feixe era monoenergético, unidirecional e o número de nêutrons por unidade de volume compondo o feixe não variava no tempo, porém, é possível generalizar a ideia e aplicar o conceito de taxa de reação para uma posição no espaço que é bombardeada por nêutrons com qualquer energia e provenientes de qualquer direção, considerando ainda que a densidade destes varia no tempo.

Para isto, restringe-se a análise em nêutrons cuja direção de movimento esteja dentro do ângulo sólido infinitesimal $d\mathbf{\Omega}$ ao redor de $\mathbf{\Omega}$ e cuja energia cinética esteja entre dE infinitesimal ao redor de E, além disso, seja $I_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE$ a intensidade diferencial do feixe, que neste caso representa o fluxo de nêutrons, em $\mathbf{r}$ e no instante t caracterizado por esta restrição, ou seja, considerando nêutrons em $d\mathbf{\Omega}$ ao redor de $\mathbf{\Omega}$ e em dE ao redor de E. Utilizando a função densidade angular de nêutrons definida acima, tem-se

$$I_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE = n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)v(E)d\mathbf{\Omega}dE \tag{2.14}$$

Onde $I_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ representa uma função de densidade de intensidade, também conhecido como fluxo angular de nêutrons.

Consequentemente, escrevendo a taxa de reação diferencial em $\mathbf{r}$ e t, levando em

[1]Como a intensidade de nêutrons representa o número de nêutrons por unidade de área e por unidade de tempo que atingem determinada superfície, se existem n nêutrons por unidade de volume no feixe e como estes nêutrons monoenergéticos estão se movendo com uma velocidade v, então $I = nv$, uma vez que qualquer nêutron a uma distância de v unidades de distância da placa alvo irá acertar esta em uma unidade de tempo.

conta nêutrons com energia entre dE ao redor de E e direção de movimento entre $d\mathbf{\Omega}$ ao redor de $\mathbf{\Omega}$, como $R_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE$, obtém-se

$$\begin{aligned} R_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE &= \Sigma_t(E)I_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE \\ &= \Sigma_t(E)n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)v(E)d\mathbf{\Omega}dE \end{aligned} \tag{2.15}$$

Onde $R_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ é a taxa de reação por unidade de energia e por unidade de ângulo sólido na posição $\mathbf{r}$, com energia E, direção $\mathbf{\Omega}$ e no instante t.

Finalmente, integrando $R_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ para obter a distribuição acumulada da taxa de reação em $\mathbf{r}$ e em t, considerando nêutrons com qualquer energia e provenientes de qualquer direção, tem-se

$$\begin{aligned} R_0(\mathbf{r}, t) &= \int_0^\infty \int_{4\pi} R_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}dE \\ &= \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_t(E)n(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)_2v(E)d\mathbf{\Omega}dE \end{aligned} \tag{2.16}$$

Como $\mathbf{r}$ e t são arbitrários, a análise vale para qualquer posição do espaço e instante de tempo. Note que na Equação 2.16 todos os tipos de interação são considerados, por isso o uso do Σ_t. A mesma análise pode ser feita para qualquer tipo específico de interação, conforme classificadas na seção 2.1, de tal forma que a taxa de reação obtida estará restrita à interação analisada.

Uma outra forma de analisar a taxa de reação e que será utilizada no decorrer deste trabalho, é considerar a densidade da taxa de reação no ponto $\mathbf{r}$ e no instante t dependendo da energia. Para isso, basta diferenciar a distribuição acumulada descrita na Equação 2.16 em relação à energia, ou integrar a densidade de taxa de reação introduzida na 2.15 considerando todas as direções possíveis, resultando em

$$R_1(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma_t(E)v(E) \int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega} \tag{2.17}$$

Onde $\int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)d\mathbf{\Omega}$ é simplesmente o número total de nêutrons por unidade de volume e por unidade de energia na posição $\mathbf{r}$, com energia E e no instante t.

Por fim, destaca-se que o fluxo de nêutrons, ou a intensidade do feixe de nêutrons, introduzido a partir de conceitos experimentais na abordagem acima, também aparece naturalmente na teoria de transporte por meio da equação de Boltzmann [Duderstadt

e Martin, 1979], sendo esta a variável dependente de interesse na equação. Neste caso, usualmente se utiliza a letra ϕ para designar esta grandeza, sendo que o fluxo angular de nêutrons ou fluxo de espaço de fase é dado por

$$\phi_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) = v(E) n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) \tag{2.18}$$

Enquanto que o fluxo espectral de nêutrons ou o fluxo de nêutrons por energia é dado por

$$\phi_1(\mathbf{r}, E, t) = v(E) \int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) d\mathbf{\Omega} \tag{2.19}$$

3 MÉTODO MONTE CARLO

Em torno de 1940, cientistas que trabalhavam com o desenvolvimento de armas nucleares nos Estados Unidos introduziram o termo Monte Carlo para denominar uma classe de métodos matemáticos utilizados em seus estudos. Atualmente, define-se um método de Monte Carlo aquele que envolve o uso exaustivo de números aleatórios em problemas que possuem a estrutura de um processo estocástico, ou seja, problemas que possuem uma sequência de estados cuja evolução é determinada através de eventos aleatórios [Kalos e Whitlock, 2004].

O método de Monte Carlo é amplamente aplicado em diversos problemas de física e engenharia, tais como no transporte de radiação, na transferência de calor e na teoria nuclear, mais especificamente no transporte de nêutrons, contexto no qual a presente dissertação se insere.

3.1 Monte Carlo no Transporte de Nêutrons

O método de Monte Carlo aparece como uma alternativa no estudo de transporte de partículas principalmente devido aos erros sistemáticos envolvidos nas abordagens determinísticas, isto é, erros oriundos das idealizações utilizadas e que não podem ser eliminados. Tais erros são derivados da discretização do espaço de fase, como já abordado no Capítulo 1, e principalmente do uso de modelos simplificados que representam a configuração real do problema, como por exemplo, o uso de modelos bidimensionais para tratar problemas de três dimensões.

Por outro lado, o uso do método de Monte Carlo permite o tratamento de problemas com geometrias mais complexas, sem a necessidade das simplificações geralmente aplicadas nos métodos determinísticos. Com isto, no caso do Monte Carlo, os erros associados deixam de ser sistêmicos e passam a ser estocásticos, ou seja, podem ser eliminados ou pelo menos diminuídos [Lewis e Miller, 1984].

Existem duas maneiras de utilizar o método de Monte Carlo na solução de problemas de transporte de partículas neutras. Uma delas é baseada no fato de que este método é utilizado como uma técnica matemática para resolver integrais numericamente, sendo assim, este é utilizado para solucionar a equação de transporte na forma integral.

A outra maneira de empregar o método consiste em simular o processo físico em

cada ponto da história de cada nêutron com base em descrições probabilísticas representadas por distribuições que fornecem os possíveis eventos que podem ocorrer, desta forma, toda a história de todos os nêutrons pode ser registrada. Simulando um número suficientemente grande de histórias de nêutrons, partindo de uma população de nêutrons inicial, é possível obter propriedades físicas de interesse, como a distribuição destes no meio, sendo que quanto maior o número de histórias simuladas, menores serão os erros estatísticos envolvidos [Carter e Cashwell, 1975]. Esta segunda abordagem é denominada de Monte Carlo físico.

Uma das características do Monte Carlo físico é que a equação de transporte não é utilizada, o que faz sentido uma vez que o transporte de partículas é por si só um processo aleatório, desta forma, uma simulação direta deste fenômeno também deve ser de natureza estocástica. Além disso, como a aleatoriedade do processo é levada em conta, considerando hipoteticamente um número infinito de histórias simuladas, seria possível obter o comportamento exato das distribuições de nêutrons no domínio, inclusive flutuações que não são obtidas através dos métodos determinísticos. Mesmo não sendo possível, por razões óbvias, realizar tal simulação, esta propriedade bastante atraente é uma das principais razões para que se utilize o método Monte Carlo no transporte de partículas [Larsen, 2006; Carter e Cashwell, 1975].

Os estudos da presente dissertação foram realizados em um simulador baseado no método Monte Carlo físico, conforme será exposto na próxima seção.

3.2 Simulador Monte Carlo

O simulador utilizado e aprimorado no presente trabalho, já introduzido no Capítulo 1, será descrito com maiores detalhes nesta seção. Todas as informações obtidas nesta podem ser encontradas de forma ainda mais detalhada em de Camargo, 2011, de Camargo et al., 2013, Barcellos et al., 2015, Barcellos, 2016, Barcellos et al., 2021b e Barcellos, 2021.

Desenvolvido em linguagem C++, o programa segue os padrões da computação paralela, sendo que este é contínuo na posição, na direção de movimento, na energia e no tempo, ou seja, é contínuo em todas as sete dimensões da equação de Boltzmann. Além disso, a filosofia de interação e *tracking* do simulador é a mesma que a utilizada no GEANT.

Com base em uma população inicial pré definida, a história de cada nêutron é simulada individualmente através de passos Monte Carlo, sendo que ao final de cada passo, a não ser que o nêutron escape do domínio de interesse, uma interação ocorre, ou seja, o passo Monte Carlo é caracterizado pelo caminho percorrido pelos nêutrons até uma interação. Nesta seção, a estrutura principal do passo Monte Carlo simulado, resumida na Figura 3.1, é detalhada.

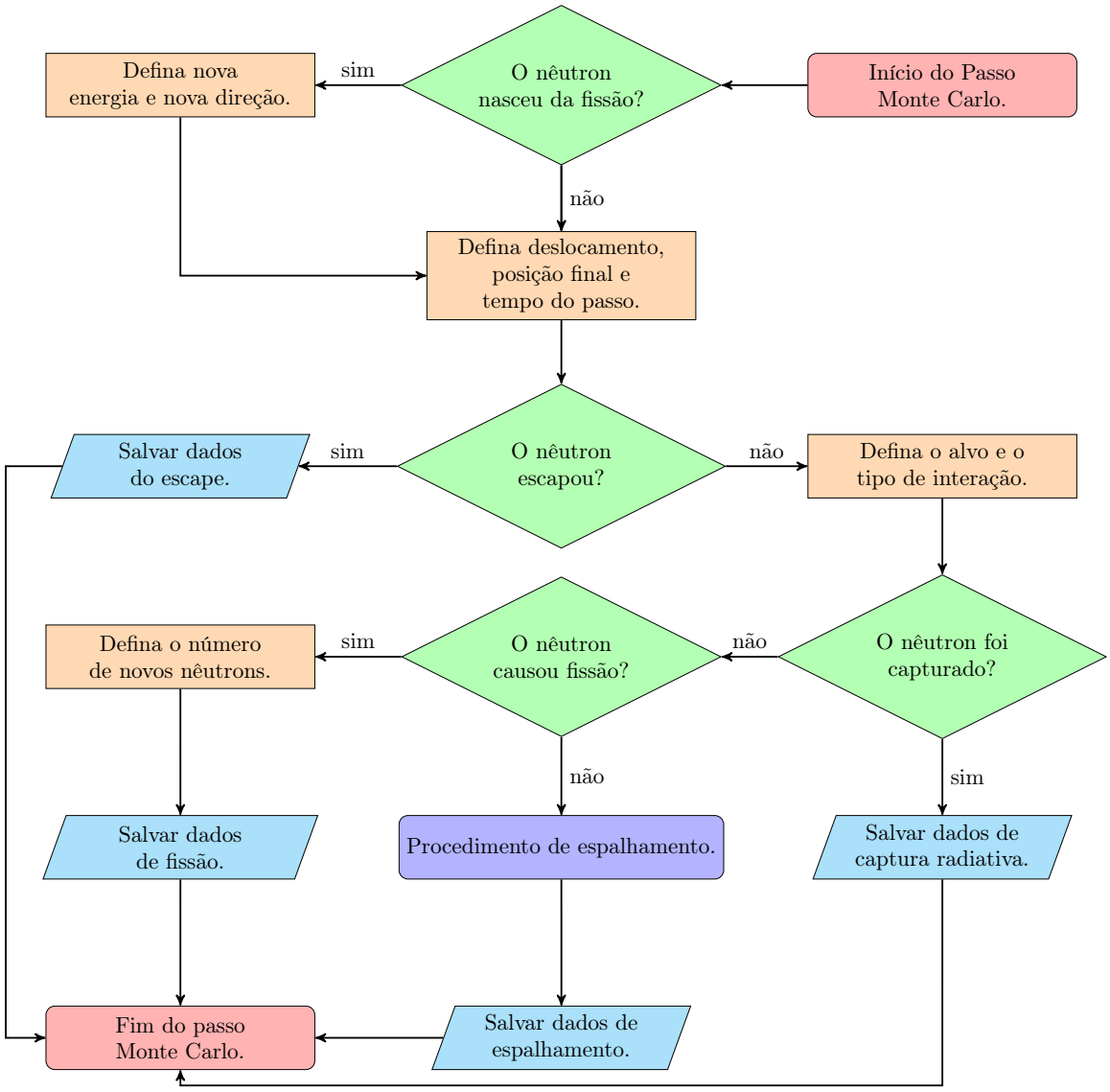


Figura 3.1 – Fluxograma do passo Monte Carlo [Adaptado de Barcellos, 2021].

No começo de cada passo Monte Carlo, caso o nêutron provenha de fissão, uma direção de propagação é obtida estocasticamente de tal forma que esta permitirá encontrar a posição final do nêutron. A direção de propagação depende de dois ângulos, um azimutal α que varia entre $[0, 2\pi]$ e outro polar β que varia entre $[\frac{-\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$. Ambos os ângulos são

escolhidos aleatoriamente a partir de distribuições uniformes. Destaca-se que se o nêutron é oriundo da população inicial, sua posição inicial será a localização da fonte no meio, por outro lado, se o nêutron é derivado de uma interação de fissão que ocorreu em outro passo Monte Carlo, sua posição inicial será a localização da respectiva interação no domínio.

Além disso, os nêutrons nascidos de fissão também terão uma energia cinética associada e que é obtida estocasticamente de acordo com a distribuição que representa o espectro de fissão imediata, sendo que para o nuclídeo ^{235}U, esta é dada por

$$\chi(E) = 0.453e^{-1.036E} \sinh\left(\sqrt{2.29E}\right) \tag{3.1}$$

Onde E é a energia cinética do nêutron em MeV.

Por outro lado, caso o nêutron não tenha nascido de fissão, suas características como posição inicial, direção de movimento e energia são as mesmas do final do passo anterior.

Posteriormente, o caminho percorrido pelo nêutron é selecionado estocasticamente até uma posição final. Esta posição dependerá das características do nêutron previamente obtidas, ou seja, da energia cinética do nêutron, da sua posição no começo do passo e da direção de movimento do nêutron, além de depender da seção de choque macroscópica do meio. Este processo consiste em selecionar de maneira aleatória um múltiplo S do meio caminho livre de tal forma que o deslocamento percorrido pelo nêutron no respectivo passo será

$$L = S\Sigma_t^{-1} \tag{3.2}$$

Onde Σ_t é a seção de choque macroscópica do meio.

Com isso, a posição final do nêutron no espaço é obtida, e caso esta posição esteja fora dos contorno do domínio de interesse, é dito que o nêutron escapou e o passo Monte Carlo, bem como a história do nêutron, termina ao passo de que um novo nêutron é selecionado, começando novamente a contagem dos passos. Por outro lado, caso a posição do nêutron após o deslocamento esteja situada dentro do domínio, uma interação ocorrerá neste ponto.

Antes de definir o tipo de interação, o nuclídeo alvo é escolhido aleatoriamente com base nas seções de choque macroscópica total de cada um que compõe o meio, uma vez que estas estão associadas com a probabilidade de que uma interação qualquer entre

o nêutron e o nuclídeo em questão ocorra, como já abordado no Capítulo 2.

Após a escolha aleatória do nuclídeo alvo, o tipo de interação é obtido por meio de mais um processo estocástico. Neste caso, para o alvo em questão, toma-se a razão entre a seção de choque macroscópica de cada interação pela seção de choque total e cria-se assim uma distribuição de probabilidades que permite escolher o tipo de interação aleatoriamente.

Atualmente, o código conta com três tipos de interações, o espalhamento elástico, a captura radiativa e a fissão, uma vez que estas são as que dominam a física da maioria dos reatores nucleares. Isso significa que no processo de escolha do tipo de interação descrito acima, a seção de choque total é a soma das seções de choque dos três tipos de interações considerados no simulador.

Sendo assim, caso a interação escolhida estocasticamente seja a de captura radiativa, o procedimento é semelhante ao escape, ou seja, o passo Monte Carlo e a história do nêutron terminam e um novo nêutron é escolhido e simulado.

Caso a interação escolhida seja a de fissão, então um processo estocástico é realizado antes do final do passo Monte Carlo. Este fornece o número de nêutrons nascidos da fissão, sendo que um número aleatório ν, que de fato representa o número de nêutron nascidos do respectivo processo de fissão, é gerado de tal forma que este pode assumir o valor de 2 ou de 3, sendo que na média geral esta operação resulta em $\bar{\nu} = 2.48$. Este valor coincide com o valor esperado de ν para fissão induzida por nêutrons térmicos do nuclídeo ^{235}U, que é o isótopo responsável pela grande maioria da fissão nuclear que ocorre em reatores térmicos. Além disso, a história do nêutron que induz a fissão também termina, porém a posição final deste é utilizada para definir a posição inicial dos nêutrons que nasceram no processo, como descrito no início do passo Monte Carlo.

A última interação possível é a de espalhamento elástico, sendo que nesta, uma nova direção e uma nova energia é associada ao nêutron. Considerando uma colisão no sentido clássico entre um nêutron e um núcleo alvo em repouso em relação ao nêutron, ou seja, duas esferas se chocando, e aplicando a conservação de energia e de momento no processo, é possível obter

$$E' = E\left(\frac{M^2 + 2Mm\cos(\theta) + m^2}{(M+m)^2}\right) \tag{3.3}$$

Onde M é a massa do núcleo alvo, m é a massa do nêutron, E é a energia cinética do

nêutron antes da colisão, E' é a energia cinética do nêutron após a colisão, ambas medidas no sistema laboratório, e θ é o ângulo de espalhamento medido no sistema centro de massa.

Como o simulador considera que o espalhamento é isotrópico, o ângulo θ utilizado na Equação 3.3 é obtido aleatoriamente a partir de uma distribuição uniforme, sendo que este pode assumir valores dentro do intervalo $[0, \pi]$.

Por inspeção, é possível observar que na Equação 3.3 os nêutrons sempre perderão energia na colisão com o núcleo alvo, ou seja, este processo para encontrar a nova energia do nêutron considera apenas efeitos de *down-scattering*. Porém, para nêutrons com energias próximas daquelas que caracterizam o regime térmico, o movimento térmico do núcleo alvo não é mais desprezível em relação à energia cinética do nêutron, logo não é mais possível considerar que o alvo está em repouso em relação ao nêutron. Neste caso, efeitos de *up-scattering*, ou seja, interações que implicam em um ganho de energia por parte do nêutron, devem ser considerados.

Neste caso, o simulador considera que o espectro de energia dos nêutrons térmicos pode ser aproximado pela distribuição de Maxwell-Boltzmann. Desta forma, na interação de espalhamento, um número é escolhido aleatoriamente entre 0 e 1, sendo que se este for maior que a distribuição acumulada de Maxwell-Boltzmann, então o nêutron está em equilíbrio térmico com o ambiente. Nêutrons que pertencem ao regime térmico adquirem uma nova energia em cada interação de espalhamento, sendo que esta é obtida aleatoriamente com base no espectro de Maxwell-Boltzmann. Caso contrário, a Equação 3.3 é utilizada e o *down-scattering* computado.

A outra informação que deve ser obtida no espalhamento é a definição da nova direção do nêutron que interagiu, uma vez que esta, juntamente com a sua nova energia, será utilizada no início do próximo passo Monte Carlo para encontrar o novo caminho percorrido pelo respectivo nêutron. Este procedimento depende da direção com que o nêutron se aproxima da colisão e de outros dois ângulos. O primeiro deles se refere ao ângulo de espalhamento medido no sistema laboratório da colisão e é dado por

$$\psi = \cos^{-1}\left(\frac{M\cos(\theta) + m}{\sqrt{M^2 + 2Mm\cos(\theta) + m^2}}\right) \tag{3.4}$$

Onde θ é o ângulo de espalhamento medido no sistema centro de massa e que também é utilizado para encontrar a nova energia do nêutron, de acordo com a Equação 3.3.

Um outro ângulo (Φ) é utilizado no processo, descrito com maiores detalhes em

[Barcellos, 2016], e também é definido aleatoriamente a partir de uma distribuição uniforme e pode assumir qualquer valor entre $[0, 2\pi]$. Sendo assim, com base na direção do nêutron que se aproxima da colisão, de ψ e de Φ, a nova direção de movimento do nêutron, após a colisão, pode ser encontrada e juntamente com a nova energia do nêutron e a posição da interação, ser utilizada no próximo passo Monte Carlo.

O processo de espalhamento elástico descrito acima e que compõe o fluxograma da Figura 3.1 é ilustrado, também através de um fluxograma, na Figura 3.2.

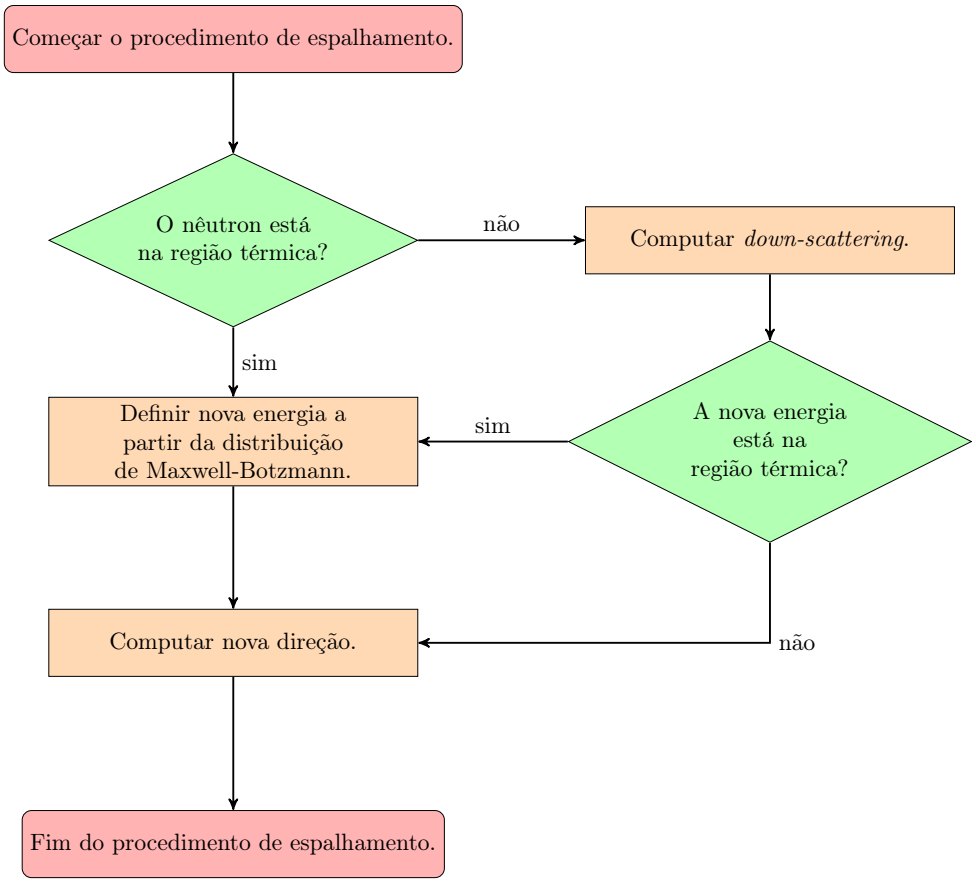


Figura 3.2 – Fluxograma do processo de espalhamento [Adaptado de Barcellos, 2021].

4 OTIMIZAÇÃO

Problemas de otimização aparecem em praticamente todas as áreas da ciência e engenharia, sendo que estes podem ser introduzidos resumidamente da seguinte forma. Dada uma função objetivo f que depende de uma ou mais variáveis independentes, o problema de otimização consiste em encontrar quais são os valores destas variáveis independentes que maximizam ou minimizam a função f.

Neste contexto, um problema de otimização surge no presente trabalho, uma vez que um dos objetivos deste é a parametrização dos dados experimentais que descrevem as seções de choque nucleares, ou seja, buscam-se parâmetros ideais que permitam construir funções analíticas que representam com boa aproximação as observações sendo que a escolha destes parâmetros ideais caracteriza um problema de otimização. Além disto, o processo de otimização será utilizado na parametrização dos resultados obtidos na simulação Monte Carlo, já que estas parametrizações serão utilizadas na construção de uma função analítica que representa a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons, como será abordado no próximo capítulo.

Desta forma, considere um conjunto de m dados experimentais, sejam estes os dados das seções de choque obtidos nas bibliotecas nucleares ou os resultados obtidos através da simulação Monte Carlo, representados pelos pontos (t_1, y_1), (t_2, y_2), $\cdots$, (t_m, y_m). Ademais, seja $M_f(\boldsymbol{x}, t)$ a função modelo analítica que depende do vetor de parâmetros ajustáveis $\boldsymbol{x}$ e do ponto t e que deve descrever de forma precisa as observações. Para o processo de otimização, utiliza-se como função objetivo a soma do quadrado dos resíduos ponderados pelo desvio padrão de cada observação e que varia com o vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$, sendo que esta é dada por

$$\chi^2(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{r_i(\boldsymbol{x})}{\zeta_i} \right)^2 = \sum_{i=1}^{m} \left(\frac{y_i - M_f(\boldsymbol{x}, t_i)}{\zeta_i} \right)^2 \tag{4.1}$$

Onde ζ_i representa o desvio padrão do i-ésimo dado.

Note que a função objetivo descrita pela Equação 4.1 é definida de tal forma que o valor desta diminui conforme a função modelo descreve com maior precisão as observações. Desta forma, o processo de otimização para o presente trabalho consiste na escolha dos parâmetros que formam a função modelo visando a minimização de χ^2.

Para a implementação computacional do processo, é conveniente escrever a Equa-

ção 4.1 na forma matricial. Sendo assim, define-se o vetor coluna $\boldsymbol{y}$ e o vetor coluna $\boldsymbol{M}$ em $\boldsymbol{x}$ como

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} M_f(\boldsymbol{x}, t_1) \\ M_f(\boldsymbol{x}, t_2) \\ \vdots \\ M_f(\boldsymbol{x}, t_m) \end{bmatrix} \tag{4.2}$$

Além disso, definindo a matriz peso $\boldsymbol{W}$ tal que esta é diagonal e seus elementos são $W_{ii} = \frac{1}{\zeta_i^2}$, tem-se

$$\boldsymbol{W} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\zeta_1^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{\zeta_2^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{\zeta_m^2} \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

Com base na Equação 4.2 e na Equação 4.3, é possível reescrever a Equação 4.1 na forma matricial tal que

$$\begin{aligned} \chi^2(\boldsymbol{x}) &= (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}))^\top \boldsymbol{W} (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})) \\ &= \boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \end{aligned} \tag{4.4}$$

Logo, busca-se o vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$ tal que a função χ^2 é minimizada. Vale destacar que a função modelo $M_f(\boldsymbol{x}, t)$ pode ser linear, quando esta é linear nos parâmetros $\boldsymbol{x}$, ou não linear, quando $M_f(\boldsymbol{x}, t)$ não é linear nos parâmetros. Como será abordado no próximo capítulo, para o presente trabalho, a função modelo utilizada nas parametrizações dos dados nucleares são, na grande maioria, racionais. Desta forma, o problema de mínimos quadrados associado é não linear e, diferentemente dos problemas lineares em que a otimização é realizada através de um único passo resolvendo um sistema de equações matriciais, solucionado através de um algoritmo iterativo. Este algoritmo reduz o valor da função descrita na Equação 4.4 através de uma sequência de escolhas que atualizam o vetor $\boldsymbol{x}$ visando a minimização de χ^2 [Gavin, 2020].

Entre os diversos algoritmos utilizados em otimização não linear, destaca-se o Levenberg-Marquardt. Conforme Heath, 2018, este pode ser introduzido de várias for-

mas, sendo que no presente trabalho, a derivação do método será feita com base na combinação de outros dois métodos de minimização, o método do gradiente e o método de Gauss-Newton.

4.1 Método do Gradiente

O método do gradiente é baseado no operador gradiente ∇, já que a direção que representa a maior taxa de variação de uma função em determinado ponto do domínio é dada pelo gradiente desta função neste ponto. Como o sentido do gradiente é a região do domínio que aumenta a respectiva função e o objetivo é encontrar o ponto que minimiza esta, usa-se o negativo do gradiente, já que consequentemente este aponta para pontos do domínio em que a função decresce mais rapidamente [Heath, 2018].

Para o presente trabalho, aplica-se o método do gradiente na minimização de χ^2, com isso, a partir de uma estimativa inicial de $\boldsymbol{x}$, é possível deslocar este vetor na direção oposta ao gradiente de χ^2 neste ponto e obter um novo vetor de parâmetros que diminui a respectiva função objetivo. Com base neste novo vetor, realiza-se o mesmo procedimento e o processo continua iterativamente até que um vetor de parâmetros ótimo minimize a função χ^2 ou diminua esta até um resultado satisfatório.

Descrevendo matematicamente este processo, dada uma iteração caracterizada por um vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$ conhecido, o vetor de incremento que atualiza $\boldsymbol{x}$ será

$$\boldsymbol{h_g} = -\eta \nabla \chi^2(\boldsymbol{x}) \tag{4.5}$$

Onde $\boldsymbol{h_g}$ representa o incremento no vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$ na iteração, η é um escalar positivo que controla o incremento de $\boldsymbol{x}$ na direção oposta ao gradiente e $\nabla \chi^2(\boldsymbol{x})$ representa o gradiente da função objetivo no ponto $\boldsymbol{x}$.

Uma vez que $\nabla \chi^2 = \left(\frac{\partial \chi^2}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^\top$, onde $\frac{\partial \chi^2}{\partial \boldsymbol{x}}$ é um vetor linha cujas entradas correspondem às derivadas parciais de χ^2 com respeito às entradas de $\boldsymbol{x}$, e com base na Equação 4.4, tem-se

$$\begin{aligned} \nabla \chi^2(\boldsymbol{x}) &= \left(\frac{\partial \left(\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \right)}{\partial \boldsymbol{x}} \right)^\top \\ &= \left(\frac{\partial \left(\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{y} \right)}{\partial \boldsymbol{x}} + \frac{\partial \left(-2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \right)}{\partial \boldsymbol{x}} + \frac{\partial \left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \right)}{\partial \boldsymbol{x}} \right)^\top \end{aligned} \tag{4.6}$$

Como a derivada do primeiro termo é nula, pois este não depende do vetor $\boldsymbol{x}$, e com base em propriedades do cálculo matricial, é possível reescrever a Equação 4.6 como

$$\nabla\chi^2(\boldsymbol{x}) = \left(-2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top\left(\boldsymbol{W}+\boldsymbol{W}^\top\right)\frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^\top \tag{4.7}$$

Manipulando o lado direito da Equação 4.7 e sabendo que a matriz $\boldsymbol{W}$ é simétrica, tem-se

$$\begin{aligned}\nabla\chi^2(\boldsymbol{x}) &= \left(-2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} + 2\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^\top \\ &= \left(-2\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)^\top \boldsymbol{W}\frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^\top\end{aligned} \tag{4.8}$$

Finalmente, utilizando as propriedades da transposta do produto de matrizes, $\nabla\chi^2(\boldsymbol{x})$ será

$$\begin{aligned}\nabla\chi^2(\boldsymbol{x}) &= -2\left(\frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^\top \boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right) \\ &= -2\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)\end{aligned} \tag{4.9}$$

Onde $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ representa a matriz jacobiana de $\boldsymbol{M}$ com respeito a $\boldsymbol{x}$, ou seja, $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$.

Sendo assim, dado um $\boldsymbol{x}$ conhecido em determinada iteração, o incremento $\boldsymbol{h_g}$ neste vetor de parâmetros pode ser obtido substituindo o $\nabla\chi^2(\boldsymbol{x})$ da Equação 4.9 na Equação 4.5, resultando em

$$\boldsymbol{h}_g = 2\eta\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right) \tag{4.10}$$

Vale destacar que o método do gradiente é desejável pois, desde que o gradiente não seja nulo, este sempre implicará em um vetor de parâmetros que diminua a função objetivo. Apesar disto, o processo de convergência para um vetor de parâmetros ideal pode ser bastante lento, principalmente quando a função objetivo não é simples [Gavin, 2020; Heath, 2018].

4.2 Método de Gauss-Newton

O método de Gauss-Newton consiste em um processo iterativo no qual busca-se minimizar a função objetivo assumindo que esta é localmente quadrática nos parâmetros próximo da solução ótima [Gavin, 2020]. Com base nesta hipótese e na função objetivo definida para o presente trabalho, dada pela Equação matricial 4.4, é possível formalizar o método conforme exposto abaixo.

Dado um vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$ próximo da solução ótima, da hipótese, tem-se que a função modelo e consequentemente $\boldsymbol{M}$ será linear em torno deste ponto. Sendo assim, é possível expandir $\boldsymbol{M}$ através da série de Taylor em $\boldsymbol{x}$, sendo que o comportamento da função em um novo vetor de parâmetros $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}$ próximo de $\boldsymbol{x}$ pode ser aproximado pela primeira ordem da série, ou seja, $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h})$ será

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) \approx \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \frac{\partial \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{h} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h} \tag{4.11}$$

Analisando agora a função objetivo χ^2 escrita na forma matricial no mesmo ponto $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}$, tem-se

$$\chi^2(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) = \boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h})^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) \tag{4.12}$$

Como o vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$ está próximo da solução ótima, é possível reescrever a Equação 4.12 utilizando a primeira ordem da série de Taylor de $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h})$, dada pela Equação 4.11. Desta forma, $\chi^2(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h})$ será

$$\begin{aligned}
\chi^2(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h}) \approx\ & \boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right) \\
& + \left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)^\top \boldsymbol{W} \left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right) \\
\approx\ & \boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h} + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \\
& + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W} \left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right) + \left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)^\top \boldsymbol{W} \left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Note que $\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})$ é uma matriz 1×1, logo esta é simétrica e é possível reescrever a Equação 4.13 considerando que $\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) = \left(\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)^\top \boldsymbol{W} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)^\top$. Com isto, obtém-se que

$$\begin{aligned}\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) \approx \boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h} + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \\ + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}) + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}^\top(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}) + (\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h})^\top \boldsymbol{W}(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h})\end{aligned} \tag{4.14}$$

Além disto, uma vez que $\boldsymbol{W}$ também é simétrica, manipulando e reescrevendo o lado direito da Equação 4.14, a aproximação da função objetivo no ponto $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}$ próximo de $\boldsymbol{x}$ será

$$\begin{aligned}\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) \approx \boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{y} - 2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}) \\ - 2\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h} + \boldsymbol{h}^\top \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\end{aligned} \tag{4.15}$$

O objetivo de escrever χ^2 como função de $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}$ conforme a Equação 4.15 é que, dado o $\boldsymbol{x}$ fixo que satisfaça a hipótese apresentada no começo da seção, $\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})$ dependerá apenas do vetor de incremento $\boldsymbol{h}$ e será quadrática neste, de modo que, uma vez que a sua matriz hessiana é simétrica e se $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})$ é *full rank*, então é possível demonstrar que a sua matriz hessiana também é positivo definida, como consta em [Madsen et al., 2004]. Como consequência disto, para o $\boldsymbol{x}$ fixo, $\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})$ possui um único mínimo que pode ser encontrado igualando a zero a derivada desta função com respeito a $\boldsymbol{h}$.

Desta forma, é necessário computar a derivada de $\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})$ com respeito a $\boldsymbol{h}$, sendo que esta pode ser aproximada com base na Equação 4.15 e é dada por

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{h}}\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) \approx \frac{\partial(\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{h}} + \frac{\partial\left(-2\boldsymbol{y}^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)}{\partial \boldsymbol{h}} + \frac{\partial\left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)}{\partial \boldsymbol{h}} \\ + \frac{\partial\left(-2\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)}{\partial \boldsymbol{h}} + \frac{\partial\left(\boldsymbol{h}^\top \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{h}\right)}{\partial \boldsymbol{h}}\end{aligned} \tag{4.16}$$

Note que os três primeiros termos da equação são nulos, além disto, com base nas propriedades do cálculo matricial, é fácil mostrar que a Equação 4.16, após manipulações algébricas, se reduz a

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{h}}\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}) \approx -2\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) + 2\boldsymbol{h}^\top \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^\top \boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) \tag{4.17}$$

Igualando a Equação 4.17 a zero e realizando algumas manipulações matemáticas, é possível obter o $\boldsymbol{h}_{gn}$ que minimiza $\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})$ para o vetor $\boldsymbol{x}$ fixo, resultando em

$$\begin{gathered}\left(\boldsymbol{h}_{gn}^{\top}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right)^{\top} = \left((\boldsymbol{y}-\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x}))^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right)^{\top} \\ \Downarrow \\ \left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right)\boldsymbol{h}_{gn} = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right)\end{gathered} \tag{4.18}$$

Assumindo que $\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right)$ possui inversa, $\boldsymbol{h}_{gn}$ será

$$\boldsymbol{h}_{gn} = \left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right)^{-1}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right) \tag{4.19}$$

Sendo assim, com base em um $\boldsymbol{x}$ fixo que satisfaça a hipótese imposta, é possível computar o vetor $\boldsymbol{h}_{gn}$, que representa o vetor de incremento no próprio $\boldsymbol{x}$ e que minimiza $\chi^2(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h})$, através da Equação 4.19, fornecendo um vetor de parâmetros atualizado que para a respectiva iteração é dado por $\boldsymbol{x}+\boldsymbol{h}_{gn}$. Desta forma, fixando o novo vetor de parâmetros atualizado, realiza-se o mesmo procedimento para encontrar um novo vetor de incremento, agora do vetor de parâmetros atualizado, que minimiza novamente a Equação 4.15. O processo é então repetido até que um critério de parada seja alcançado ou o vetor de parâmetros ótimo seja encontrado.

Destaca-se que para problemas de tamanho moderado, o método de Gauss-Newton geralmente converge muito mais rápido que o método do gradiente, porém, uma das principais limitações do método é que este apresenta problemas de convergência se o vetor de parâmetros utilizado para iniciar o processo de iteração não estiver perto o suficiente da solução ótima, uma vez que o método é baseado na hipótese de que este vetor está próxima da referida solução [Gavin, 2020; Heath, 2018].

4.3 Método de Levenberg-Marquardt

Conforme visto nas seções anteriores, tanto o método do gradiente quanto o método de Gauss-Newton possuem algumas vantagens e desvantagens. Com o objetivo de extrair as vantagens de cada um dos algoritmos citados, o método de Levenberg-Marquardt combina estes de modo que quando o vetor de parâmetros está distante do valor ótimo, este atua como o método do gradiente, em contrapartida, quando $\boldsymbol{x}$ está próximo dos parâmetros ótimos que minimizam a função objetivo χ^2, o método de Levenberg-Marquardt atua de forma semelhante ao método de Gauss-Newton [Gavin, 2020].

Com isto, o vetor de parâmetros de incremento ($\boldsymbol{h}_{lm}$) para cada iteração do algo-

ritmo de Levenberg-Marquardt é definido de tal forma que, dado um vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$ conhecido, $\boldsymbol{h}_{lm}$ satisfaz a seguinte equação

$$\left[\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right) - \xi\boldsymbol{I}\right]\boldsymbol{h}_{lm} = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{M}(\boldsymbol{x})\right) \tag{4.20}$$

Onde $\boldsymbol{I}$ representa a matriz identidade e ξ um fator de amortecimento.

Note na Equação 4.20 que altos valores de ξ implicam que o termo $\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right)$ do lado esquerdo da equação é desprezível e o vetor de incremento $\boldsymbol{h}_{lm}$ se aproxima do $\boldsymbol{h}_g$ dado pela Equação 4.10, por outro lado, um baixo valor de ξ implica que o termo $\left(\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})^{\top}\boldsymbol{W}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x})\right)$ do lado esquerdo da Equação 4.20 é dominante e $\boldsymbol{h}_{lm}$ se aproxima de $\boldsymbol{h}_{gn}$, conforme Equação 4.19. É neste sentido que o método de Levenberg-Marquardt alterna entre o método de Gauss-Newton e método do gradiente.

Conforme Gavin, 2020, usualmente se inicia o fator de amortecimento com valores altos de modo que as primeiras iterações são baseadas no método do gradiente. Além disto, caso em alguma iteração tem-se que $\chi^2(\boldsymbol{x}) < \chi^2(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h})$, então toma-se um fator de amortecimento maior. Por outro lado, caso $\chi^2(\boldsymbol{x}) > \chi^2(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{h})$, então diminui-se ξ de tal forma que o algoritmo de aproxima do método de Gauss-Newton, acelerando assim o processo de minimização. Na prática, existem diversas formas de implementar o método de Levenberg-Marquardt [Gavin, 2020; Press et al, 1992]. Estas são caracterizadas por diferentes maneiras de inicializar e atualizar o fator de amortecimento ξ, de inicializar o vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$, de computar a matriz jacobiana de $\boldsymbol{M}$ com respeito ao vetor de parâmetros $\boldsymbol{x}$ e também de implementar os critérios de convergência.

Salienta-se que devido a robustez do método de Levenberg-Marquardt, este é amplamente utilizado na solução de problemas de minimização não linear [Heath, 2018]. Atualmente existem diversos pacotes de livre acesso que possuem diferentes implementações do método, destaca-se aqui o MPFIT, que é baseado na rotina MINPACK-1, escrito em linguagem C e muito utilizado como base para outros softwares, sejam estes pagos ou também de livre acesso [Markwardt, 2009].

5 METODOLOGIA

Neste capítulo, as metodologias para a obtenção das funções analíticas que parametrizam as seções de choque através do algoritmo de Levenberg-Marquardt, conforme abordado no Capítulo 4, e para a obtenção da pseudo-seção de choque de escape de nêutrons serão apresentadas. Como a pseudo-seção depende das seções de choque, primeiramente serão abordadas as parametrizações.

5.1 Parametrização das Seções de Choque

Para a realização das parametrizações das seções de choque através de funções analíticas, três tipo de funções foram necessárias, sendo que duas destas foram utilizadas no processo de otimização propriamente dito, e a terceira função foi utilizada para dividir o domínio das seções de choque no espectro energético.

Destaca-se que antes de realizar o procedimento de ajuste de curva através do algoritmo de Levenberg-Marquardt, uma transformação de dados do tipo logarítmica é feita nas seções de choque de nêutrons obtidas nas bibliotecas nucleares. Isto fornece um maior detalhamento da seção de choque, principalmente nas regiões de ressonâncias, o que facilita o procedimento.

5.1.1 Funções Polinomiais

O primeiro tipo de função utilizado nas parametrizações foi a função polinomial dada por

$$p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_2 x^2 + a_1 x^1 + a_0 \tag{5.1}$$

Onde $n \in \mathbb{Z}^+ \cup [0]$ restringe o grau da função polinomial.

No presente trabalho, todas as funções polinomiais utilizadas no processo de otimização possuem $n \leq 6$, sendo que os valores reais a_i, com $0 \leq i \leq n$, são os parâmetros ajustados na parametrização. Este tipo de função é útil, por exemplo, para lidar com as regiões das seções de choque descritas pelo mecanismo de espalhamento potencial, ou seja, regiões em que não existem ressonâncias e consequentemente variam suavemente, o que geralmente acontece em intervalos de baixas energias e de altas energias.

Na Figura 5.1, a parametrização da região de mais baixa energia da seção de choque de espalhamento elástico do isótopo de urânio ^{238}U é ilustrada, para isto, um polinômio da mesma forma da Equação 5.1, com $n = 6$, foi utilizado.

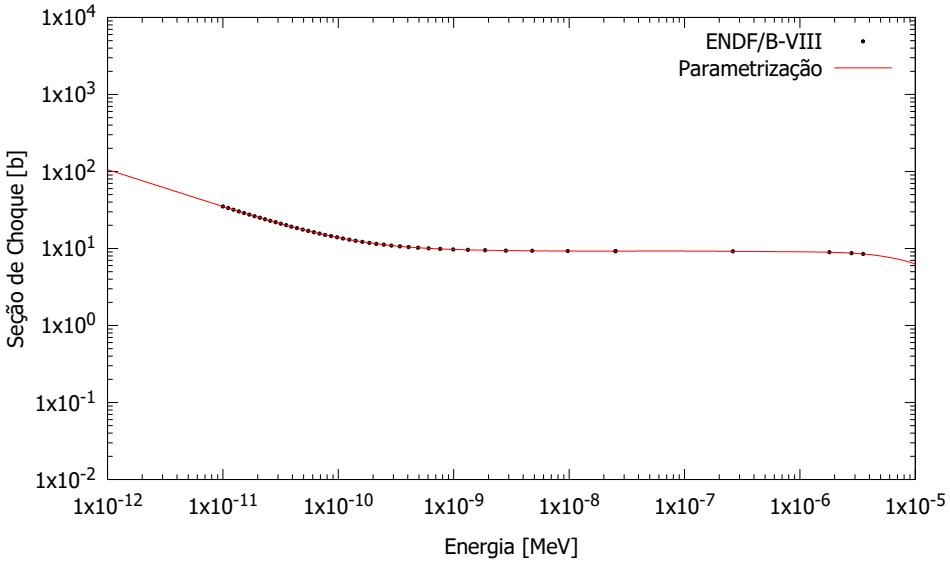


Figura 5.1 – Região de baixa energia da seção de choque do ^{238}U.

5.1.2 Funções Racionais

A segunda função utilizada no presente trabalho é do tipo racional e é dada por

$$r(x) = \frac{a_0}{1 + \left(\frac{x - a_1}{a_2}\right)^2} \tag{5.2}$$

Onde a_0, a_1 e a_2 são ajustados no processo de otimização.

O uso de funções deste tipo se deve a dois motivos. O primeiro é que uma função cuja lei de formação é dada pela Equação 5.2 não possui raízes reais no denominador, o que é uma condição necessária uma vez que a função final que parametriza as seções de choque, e que é composta por somas destas funções racionais, deve ser analítica, pelo menos em $\mathbb{R}$. Caso contrário, as descontinuidades presentes devido às raízes reais no denominador impossibilitariam a composição de uma função analítica nos reais.

O segundo motivo é que funções descritas pela Equação 5.2 possuem a mesma forma das distribuições de Breit-Wigner, conforme abordado no Capítulo 2. Por exemplo, na Equação 2.11, os termos π, $\lambda\!\!\!^{-}_{dB}$, g, Γ_n, Γ_i, Γ e E_0 são parâmetros constantes para cada ressonância, enquanto a energia cinética do nêutron varia. Desta forma, a equação poderia

ser reescrita como

$$\sigma_i = \frac{a_0}{1 + \left(\frac{E - a_1}{a_2}\right)^2} \tag{5.3}$$

Onde $a_0 = \frac{4}{\Gamma}\pi g \lambda_{dB}^2 \Gamma_n \Gamma_\gamma$, $a_1 = E_0$ e $a_2 = \frac{\Gamma}{2}$.

É possível fazer a mesma análise na Equação 2.12 para ressonâncias de espalhamento. Desta forma, a curva utilizada no processo de otimização deve parametrizar as ressonâncias individuais que compõem as seções de choque, uma vez que elas possuem, na essencia, a mesma forma das distribuições que descrevem, a partir de argumentos físicos, estas ressonâncias. Foi por este motivo que não foram introduzidos os fatores devido ao efeito Doppler nuclear nas fórmulas de Breit-Wigner no Capítulo 2, já que a ideia era mostrar a forma geral destas funções.

Observe ainda que, conforme a energia aumenta no espectro energético das seções de choque, as ressonâncias deixam de ser isoladas e passam a ser influenciadas por picos vizinhos. Neste caso, a sobreposição de funções descritas pela Equação 5.2 parametrizará a respectiva região. Por exemplo, na Figura 5.2, a variação da seções de choque de captura radiativa para o ^{235}U é ilustrada considerando um intervalo de energia entre $[7.766 \times 10^{-4}, 7.82 \times 10^{-4}]$. Este comportamento pode ser parametrizado com boa precisão através da soma, ou superposição, de três funções racionais da mesma forma da Equação 5.2, cada uma com parâmetros diferentes obtidos no processo de otimização.

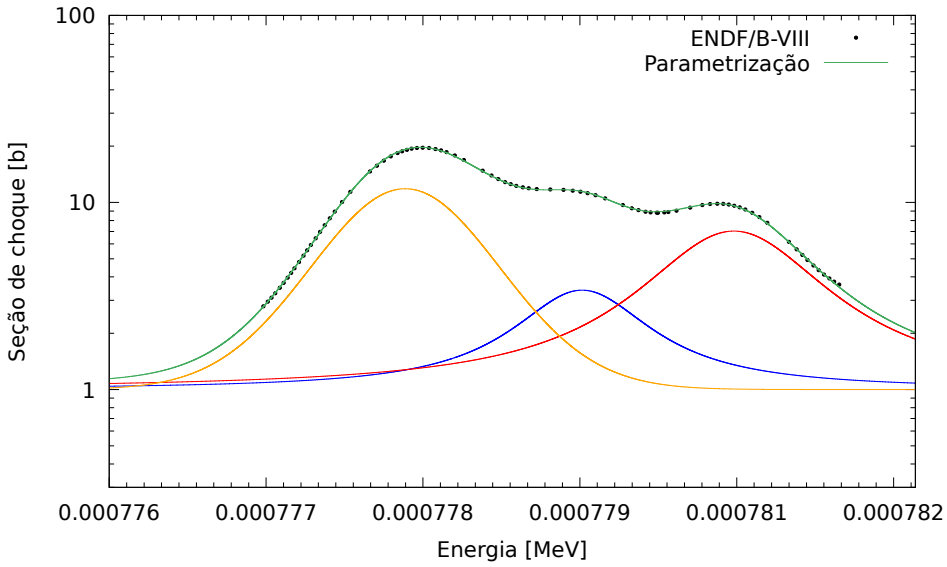


Figura 5.2 – Sobreposição de ressonâncias da seção de choque do ^{235}U.

Destaca-se que conforme as ressonâncias se sobrepõe, não é mais possível saber, a partir de argumentos físicos, quantas ressonâncias são necessárias para descrever a sobreposição em um determinado intervalo da seção de choques, uma vez que não é possível isolar ou separar os picos que compõem tal região.

Apesar de ser possível obter uma função analítica que descreve precisamente o pequeno intervalo ilustrado na Figura 5.2, a região de ressonâncias é muito densa, por exemplo, na Figura 5.3, a seção de choque de fissão do isótopo de urânio ^{235}U é ilustrada sendo que uma pequena região do espectro energético desta é aproximada. Note que esta região que equivale a um intervalo $1 \times 10^{-4}\ MeV$, correspondendo a apenas 4% de toda a região de ressonância da respectiva seção de choque, contém diversas ressonâncias e sobreposição destas.

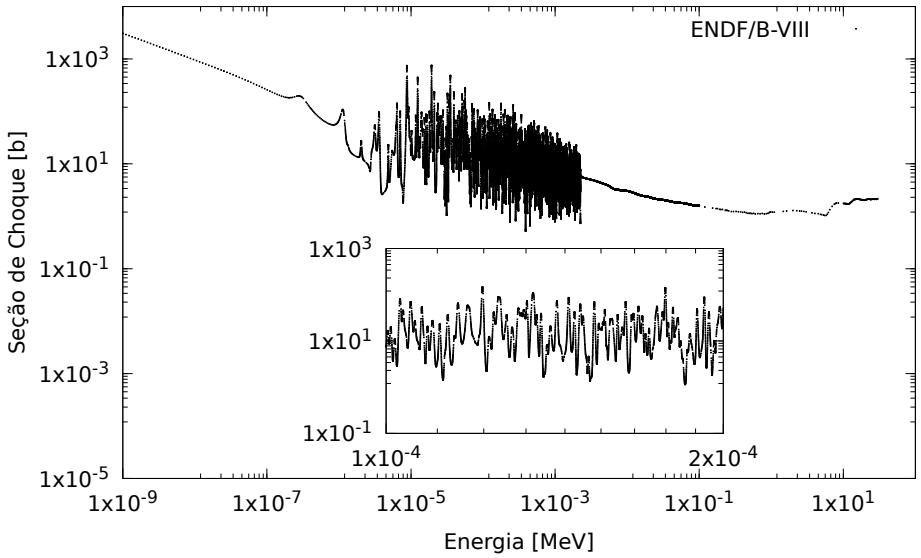


Figura 5.3 – Seção de choque microscópica de fissão do ^{235}U.

Sendo assim, em muitos casos nos quais existem muitas ressonâncias sobrepostas, um número elevado de parâmetros seriam necessários, gerando instabilidade no processo de otimização, seja divergindo no decorrer deste ou demandando muito esforço computacional. Ademais, as seções de choque apresentam comportamentos mais suaves fora das regiões de ressonâncias, onde funções polinomiais conforme Equação 5.1 são utilizadas, de modo que um ajuste nestas regiões através de funções racionais é inviável.

Com isto, para facilitar no processo de otimização, um terceiro tipo de função foi utilizado. Esta função permite dividir o domínio energético que contém as ressonâncias

em subdomínios, nos quais o processo de otimização é realizado, e mesmo assim criar uma única função final que parametrize toda a seção de choque a partir das curvas que ajustam os dados em cada subdomínios mantendo a analiticidade desta. Esta terceira função é detalhada na subseção seguinte.

5.1.3 Funções de Janela

Antes de dar uma definição, o objetivo principal das funções de janela nas parametrizações será apresentado com um exemplo.

Considere três funções reais arbitrárias tais que $f_1(x) = 2 - x$, $f_2(x) = x^2$ e $f_3(x) = 25$. Suponha uma situação onde cada uma destas funções é relevante em apenas um intervalo da reta real, de tal forma que $f_1(x)$ deve ser válida para $x < 1$, $f_2(x)$ válida para $1 \leq x \leq 5$ e $f_3(x)$ para $x > 5$. Conforme abordado no fim da subseção anterior, este tipo de situação aparece na parametrização das seções de choque, como por exemplo, na divisão desta em regiões de ressonâncias menos densas onde o processo de otimização pode ser aplicado. Neste caso, uma maneira de escrever esta situação é definindo uma função $f(x)$ condicional tal que

$$f(x) = \begin{cases} f_1(x) = 2 - x & \text{se } x < 1 \\ f_2(x) = x^2 & \text{se } 1 \leq x \leq 5 \\ f_3(x) = 25 & \text{se } x > 5 \end{cases} \tag{5.4}$$

O problema da função $f(x)$ da Equação 5.4 é que ela obviamente não é diferenciável em toda a reta real, neste caso em específico não é diferenciável nos pontos $x = 1$ e $x = 5$, e consequentemente, não é uma função analítica. Generalizando a ideia para as funções que parametrizam as seções de choque, dividindo o domínio através de uma função condicional como a $f(x)$ também implicará em uma função não analítica.

É para contornar esta situação que as funções de janela são utilizadas. Considere três funções de janela, $w_1(x)$, $w_2(x)$ e $w_3(x)$, cuja lei de formação permite construir as curvas ilustradas na Figura 5.4. Observa-se que o contradomínio de tais funções se restringe ao intervalo $[0, 1] \subset \mathbb{R}$. Além disso, note que $w_1(x) = 1$ até aproximadamente $x = 1$, posteriormente, a função decresce rapidamente até que $w_1(x) = 0$ para todo x real. $w_2(x)$, por outro lado, é nulo para toda a reta real, exceto no pequeno intervalo que se inicia em torno de $x = 1$, onde a função cresce rapidamente e se torna unitária, e termina

em torno de $x = 5$, onde w_2 decresce rapidamente e se torna nula novamente. Finalmente, $w_3(x) = 0$ até aproximadamente $x = 5$, onde esta se torna unitária e permanece assim até $+\infty$.

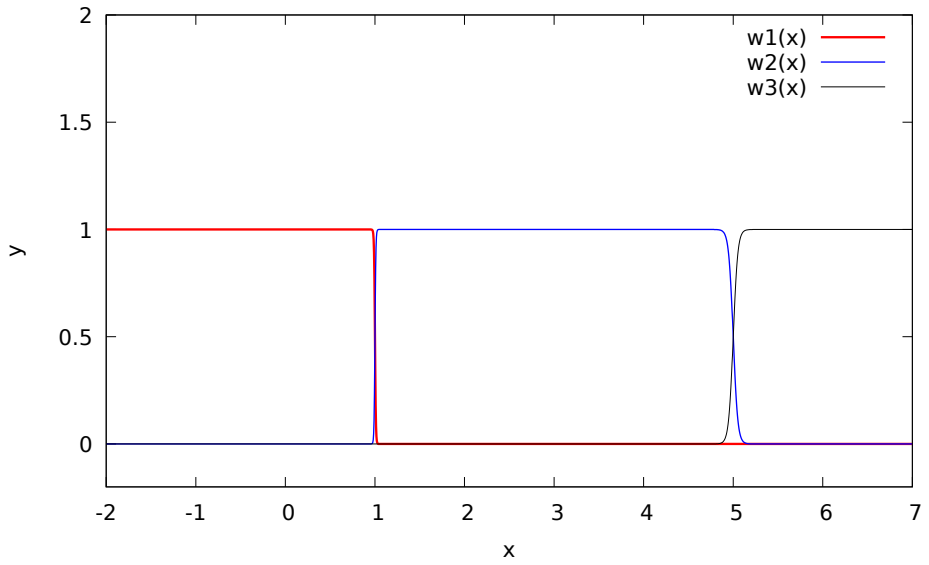


Figura 5.4 – Funções de janela.

Através das funções de janela definidas acima, é possível escrever uma função $g(x)$ que aproxima a condicional $f(x)$ da Equação 5.4 e continua sendo uma função analítica, sendo que esta é dada por

$$g(x) = f_1(x)w_1(x) + f_2(x)w_2(x) + f_3(x)w_3(x) \tag{5.5}$$

Note que pela construção de $g(x)$, as funções de cada subdomínio ($f_1(x)$, $f_2(x)$ e $f_3(x)$) só são relevantes no respectivo intervalo de interesse definido pelas funções de janela. Ou seja, é possível verificar $g(x) \approx f(x)$, como ilustrado na Figura 5.5, de tal forma que $g(x)$ é analítica.

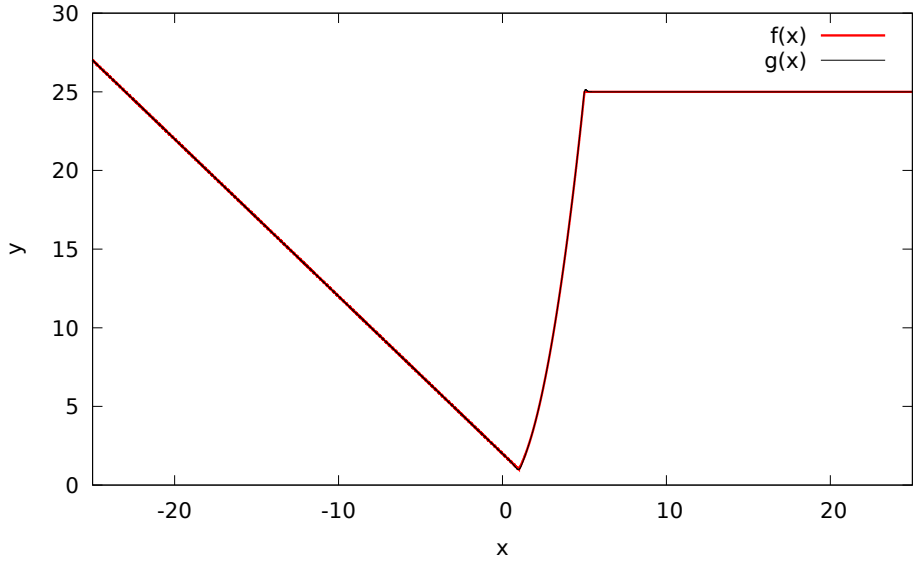


Figura 5.5 – Função de janela vs Função condicional.

De maneira geral, as funções de janela utilizadas no presente trabalho são do tipo tangente hiperbólica e definidas como

$$w(x) = \frac{1}{2}\left(\tanh(a_0(x - a_1) + a_2) + (-\tanh(a_3(x - a_4) + a_5))\right) \tag{5.6}$$

Onde os parâmetros a_0 e a_3 modelam o decrescimento e crescimento das funções de janela e são ajustados de tal forma que o erro entre os dados da seção de choque e a função que parametriza esta seja minimizado. Além disso, a_1 e a_4 limitam o intervalo em que a respectiva função de janela atua, e finalmente, a_2 e a_5 são utilizados para garantir que a função de janela atue no intervalo limitado por a_1 e a_4 e podem assumir valores de 0, 1 ou -1.

Note que para cada subdomínio da seção de choque, no qual o processo de ajuste de curva será realizado, existirá uma função de janela associada.

5.1.4 Função final

Com base nas três funções introduzidas acima, ou seja, nas funções polinomiais de acordo com a Equação 5.1, nas funções racionais conforme Equação 5.2 e nas funções de janela de acordo com a Equação 5.6, é possível parametrizar qualquer seção de choque microscópica através de uma única função analítica.

Vale destacar que com relação ao tamanho de cada subdomínio, a ideia é maximizar

este visando o menor número possível de funções de janela necessárias. Na prática, com excessão de isótopos leves em que a parametrização pode ser realizada sem o uso de funções de janela, como é o caso dos isótopos de hidrogênio, no mínimo três subdomínios são necessários, dois para as regiões que não apresentam ressonâncias e que correspondem às energias mais baixas e mais altas do espectro energético das seções de choque, e a outro para a região de ressonância.

Para as regiões que não apresentam ressonâncias, o processo de otimização é simples, porém caso o número de picos na região de ressonâncias é muito elevado, conforme já destacado, o processo de otimização neste subdomínio pode não convergir, de modo que este é dividido em dois novos subdomínios e o processo de otimização é então realizado em cada um destes, novamente, caso em algum destes novos subdomínio o processo de otimização divirja, este é dividido mais uma vez e o mesmo procedimento é repetido até que o processo de otimização convirja e forneça parametrizações descrevendo as seções de choque em cada subdomínio e que, graças as funções de janela, são utilizadas para construir uma única função final descrevendo toda a seção de choque.

Note que esta função final é, na essência, a soma do produto entre funções de janela e a soma de diversas funções racionais, quando tratando das ressonâncias, ou funções polinomiais, quando lidando com regiões que não possuem variações bruscas. Como os três tipos de funções utilizadas são analíticas, os produtos e somas destas, e consequentemente a função final única que parametriza toda a seção de choque, também serão analíticas.

A fim de analisar quantitativamente as parametrizações, é possível obter o erro relativo entre cada dado proveniente das bibliotecas nucleares e os valores no mesmo ponto obtido por meio das parametrizações, sendo que este é dado por

$$E_R = \left| \frac{x_a - x_e}{x_e} \right| \tag{5.7}$$

Onde x_a representa o valor aproximado no ponto do domínio obtido através das parametrizações, e x_e representa o valor exato no ponto obtido na biblioteca.

Destaca-se que erro relativo entre as parametrizações e os dados pode ser diminuído utilizando um número maior de parâmetros no processo de otimização, neste caso, isto é feito adicionando um número maior de funções, conforme definidas, no processo. Por exemplo, seria possível diminuir o erro relativo entre os dados e a função que parametriza estes na Figura 5.2 através do uso de mais uma função racional. É evidente que isto

implicará em um maior custo computacional, além de aumentar o tamanho da função final.

Na próxima seção, uma das aplicações das parametrizações acima na análise da fuga de nêutrons de domínios finitos será apresentada.

5.2 Pseudo-Seção de Choque de Escape de Nêutrons

O objetivo desta seção é apresentar uma metodologia para a obtenção de uma pseudo-seção de choque de escape de nêutrons que permita contribuir para o estudo de transporte de nêutrons envolvendo o escape destes em domínios finitos. A ideia geral para a obtenção desta pseudo-seção de choque é interpretar o escape como uma pseudo-interação e usar o conceito de taxa de reação juntamente com as características do método Monte Carlo físico, uma vez que este permite acompanhar os nêutrons ao longo de sua trajetória, fornecendo assim as posições e energias envolvidas em cada interação no espaço.

Considere uma simulação do transporte de nêutrons em um domínio finito usando o método de Monte Carlo físico. Restringindo inicialmente para um caso estacionário, isto é, um caso onde a distribuição de nêutrons neste domínio não varia com o tempo, a taxa de reação da interação i por unidade de energia no ponto $\mathbf{r}$, no instante t e considerando nêutrons com energia E, conforme visto no Capítulo 2, pode ser escrita com base na Equação 2.17 e é dada por

$$R_{1_i}(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma_i(E)v(E)\int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega} \tag{5.8}$$

Onde $\Sigma_i(E)$ representa a seção de choque macroscópica da interação i no meio.

Definindo agora uma pseudo-interação[1] de escape, representada pela letra z, de tal forma que esta ocorre quando um nêutron escapa do domínio finito de interesse em determinado passo Monte Carlo e é caracterizada pela posição inicial em um instante de tempo t, e a energia inicial do nêutron no respectivo passo Monte Carlo. A Figura 5.6 ilustra a história de dois nêutrons nascidos da fissão dentro de um domínio finito esférico, sendo que um destes é absorvido no meio finito e o outro sofre diversos espalhamentos até escapar do domínio, sendo que a posição das interações também é indicada na figura.

[1] A palavra pseudo neste caso se deve ao fato de que esta não é uma interação real no sentido de um nêutron colidindo com um núcleo alvo.

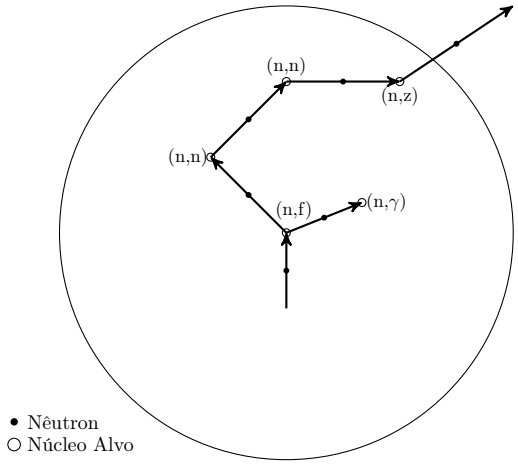


Figura 5.6 – Interações de nêutrons em um domínio finito.

Observe que, por definição, existirá uma taxa de reação por unidade de energia para a pseudo-interação de escape dada por

$$R_{1_z}(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma_z(\mathbf{r}, E)v(E)\int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega} \tag{5.9}$$

Onde $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$ representa a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons do meio.

Note que ao contrário das seções de choque macroscópicas de interações reais que variam apenas com a energia do nêutron, foi assumido que a pseudo-seção de choque varia também com a posição $\mathbf{r}$ do nêutron, uma vez que se espera que nêutrons próximos das paredes de um domínio finito possuam maior probabilidade de escapar deste em relação aos nêutrons mais afastados das superfícies. Esta suposição é validada por inspeção nas simulações. Além disso, como o caso analisado é estacionário, a pseudo-seção de choque não varia com o tempo, uma vez que a própria taxa de reação deve ser constante no tempo, porém, para um caso não estacionário, é necessário um estudo detalhado para entender a relação da pseudo-seção com o tempo.

Como o escape está sendo considerado como uma pseudo-interação, este deve ser adicionado na análise do número de interações totais no meio que incluem qualquer tipo reação nuclear. Para não confundir com o número total de interações usualmente determinado pela soma das interações de espalhamento e absorção, define-se as interações integrais, identificadas pela letra y, como a soma de qualquer tipo de interação, seja virtual, como o escape, ou real, como o espalhamento. Neste caso, a taxa de reação integral por unidade de energia será

$$R_{1_y}(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma_y(\mathbf{r}, E)v(E)\int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega} \tag{5.10}$$

Onde $\Sigma_y(\mathbf{r}, E)$ representa a seção de choque macroscópica integral, que é a soma da seção de choque macroscópica total do meio com a pseudo-seção de choque de escape, ou seja, $\Sigma_y(\mathbf{r}, E) = \Sigma_z(\mathbf{r}, E) + \Sigma_t(E)$.

Por definição, $R_{1_z}(\mathbf{r}, E, t)$ descreve o número de interações de escape por unidade de volume, por unidade de tempo e por unidade de energia em $\mathbf{r}$, considerando nêutrons provenientes de qualquer direção com energia E e em t. Semelhantemente, $R_{1_y}(\mathbf{r}, E, t)$ representa o número de interações integrais por unidade de energia, por unidade de tempo e por unidade de volume em $\mathbf{r}$, em E e em t. Lembrando que a hipótese de que a densidade não varia no tempo implica que $R_{1_y}(\mathbf{r}, E, t)$ e $R_{1_z}(\mathbf{r}, E, t)$ serão constantes em relação ao tempo.

Com base na taxa de reação, é possível obter o número de interações acumuladas até o instante de tempo t_0. Desta forma, o número de interações de escape por unidade de energia e por unidade de volume em $\mathbf{r}$, considerando nêutrons com energia E e no intervalo de tempo $\Delta t = (t_0 - 0)$, será

$$N_z(\mathbf{r}, E) = \int_0^{t_0} R_{1_z}(\mathbf{r}, E, t)dt = \Sigma_z(\mathbf{r}, E)\int_0^{t_0}\left(v(E)\int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega}\right)dt \tag{5.11}$$

De modo análogo, o número de interações integrais por unidade de volume e por unidade de energia em $\mathbf{r}$, em E e no intervalo Δt, será

$$N_y(\mathbf{r}, E) = \int_0^{t_0} R_{1_y}(\mathbf{r}, E, t)dt = \Sigma_y(\mathbf{r}, E)\int_0^{t_0}\left(v(E)\int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega}\right)dt \tag{5.12}$$

Note que o fluxo espectral de nêutrons neste intervalo de tempo, ou seja, a integral $\int_0^{t_0}\left(v(E)\int_{4\pi} n_2(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega}\right)dt$, aparece em ambas as equações, desta forma, igualando a Equação 5.11 com a Equação 5.12, obtém-se

$$\frac{N_z(\mathbf{r}, E)}{N_y(\mathbf{r}, E)} = \frac{\Sigma_z(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_y(\mathbf{r}, E)} = \frac{\Sigma_z(\mathbf{r}, E)}{\Sigma_z(\mathbf{r}, E) + \Sigma_t(E)} \tag{5.13}$$

Isolando a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$, tem-se

$$\Sigma_z(\mathbf{r}, E) = \frac{\frac{N_z(\mathbf{r},E)}{N_y(\mathbf{r},E)}\Sigma_t(E)}{1 - \frac{N_z(\mathbf{r},E)}{N_y(\mathbf{r},E)}} \tag{5.14}$$

Caso desejado, existe ainda uma maneira alternativa de escrever a Equação 5.14 visando facilitar o pós processamento das contagens obtidas nas simulações Monte Carlo. Para isto, supõe-se que as funções de densidade $N_y(\mathbf{r}, E)$ e $N_z(\mathbf{r}, E)$ podem ser separáveis e escritas como o produto de duas outras funções de densidade, uma que representa o número de interações (sejam de escape ou integrais) por unidade de volume e varia apenas com a posição $\mathbf{r}$ do nêutron no espaço e a outra que representa o número de interações por unidade de energia e que varia apenas com a energia E do nêutron. Desta forma, a Equação 5.14 pode ser obtida por

$$\Sigma_z(\mathbf{r}, E) = \frac{\frac{n_{z_r}(\mathbf{r})n_{z_E}(E)}{n_{y_r}(\mathbf{r})n_{y_E}(E)}\Sigma_t(E)}{1 - \frac{n_{z_r}(\mathbf{r})n_{z_E}(E)}{n_{y_r}(\mathbf{r})n_{y_E}(E)}} \tag{5.15}$$

Onde $n_{z_r}(\mathbf{r})$ representa o número de interações de escape por unidade de volume, $n_{z_E}(E)$ o número de interações de escape por unidade de energia, $n_{y_r}(\mathbf{r})$ o número de interações integrais por unidade de volume e finalmente $n_{y_E}(E)$ representa o número de interações integrais por unidade de energia. Vale destacar que esta simplificação não é necessariamente verdade, especialmente próximo das paredes do domínio finito. Apesar disto, a Equação 5.15 permite obter características globais satisfatórias para a $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$, como será abordado no próximo capítulo.

Considerando o caso sem a aproximação citada acima, ou seja, quando $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$ é descrita pela Equação 5.14, todos os termos do lado direito da equação podem ser obtidos. A seção de choque macroscópica total do meio $\Sigma_t(E)$ é conhecida e pode ser descrita através de uma função analítica obtida a partir das parametrizações, conforme abordado na primeira parte deste capítulo. Em relação aos outros termos necessários, como explorado no Capítulo 3, o método Monte Carlo físico permite acompanhar os nêutrons ao longo de suas histórias. Sendo assim, com o método, é possível saber, para cada nêutron e cada interação no sistema, qual a posição da interação e qual é a energia do nêutron no instante da colisão. Além disto, uma característica do Monte Carlo físico é que, diferentemente dos métodos determinísticos que fornecem resultados, como por exemplo o fluxo de nêutrons, em um ponto de determinada variável independente, este fornece os resultados através de contagens, como por exemplo o número de determinada

interação durante um intervalo de tempo, em volumes incrementais finitos ΔV, ΔE e $\Delta\Omega$ do espaço de fase que são previamente definidos. Por este motivo, as funções $N_z(\mathbf{r}, E)$ e $N_y(\mathbf{r}, E)$ podem ser facilmente obtidas a partir das simulações.

Por exemplo, seja C_i o número de interações do tipo i no incremento finito ΔV ao redor de $\mathbf{r}$ e no incremento finito ΔE ao redor de E obtidas no simulador considerando um intervalo de tempo Δt. Pela definição de $N_i(\mathbf{r}, E)$, tem-se

$$C_i = \int_{E_i}^{E_f} \int_D N_i(\mathbf{r}, E) dV dE \tag{5.16}$$

Onde D, E_f e E_i limitam o intervalo ΔV e ΔE, respectivamente.

Como a ideia é encontrar o termo $N_i(\mathbf{r}, E)$, a Equação 5.16 não é ideal, porém, note que se ΔV e ΔE são pequenos o suficiente, C_i pode ser escrita por

$$C_i \approx N_i(\mathbf{r}, E) \Delta V \Delta E \tag{5.17}$$

Na prática, o valor destes intervalos depende do número total de histórias simuladas, sendo que a amostragem em cada intervalo deve ser grande o suficiente para que erros estatísticos não sejam dominantes. Assumindo que a aproximação é válida, como ΔV e ΔE são conhecidos, o número de interações do tipo i por unidade de volume e por unidade de energia, em $\mathbf{r}$ e considerando nêutrons com energia E, durante Δt, ou seja, $N_i(\mathbf{r}, E)$, é facilmente obtido por

$$N_i(\mathbf{r}, E) \approx \frac{C_i}{\Delta V \Delta E} \tag{5.18}$$

Como $\mathbf{r}$ e E são arbitrários e todos os ΔV e ΔE em $\mathbf{r}$ e em E que formam o espaço de fase são conhecidos, é possível construir $N_i(\mathbf{r}, E)$ para todo o domínio de interesse, no caso, todo espectro energético e todas as posições no espaço. Além disso, pela construção, $N_i(\mathbf{r}, E)$ será discreta, tomando um único valor para cada intervalo ΔV e ΔE ao redor de $\mathbf{r}$ e E.

Porém, é possível utilizar a mesma metodologia de parametrização das seções de choque de nêutrons discutidas anteriormente e aplicar em $N_i(\mathbf{r}, E)$ para obter uma função analítica que a descreva. Destaca-se que esta função analítica representa, de certa forma, os valores exatos de $N_i(\mathbf{r}, E)$ em cada ponto do espaço e do domínio energético, conforme estes satisfazem a Equação 5.16.

Fazendo isto para as interações de escape e integrais, ou seja, para $N_z(\mathbf{r}, E)$ e $N_y(\mathbf{r}, E)$, todos os termos do lado direito da Equação 5.14 são conhecidos e descritos por meio de funções analíticas. A mesma abordagem pode ser restrita para a obtenção de $n_{z_r}(\mathbf{r})$, $n_{y_r}(\mathbf{r})$, $n_{z_E}(E)$ e $n_{y_E}(E)$, caso a suposição de que $N_z(\mathbf{r}, E)$ e $N_y(\mathbf{r}, E)$ são separáveis seja feita, de tal forma que todos os termos do lado direito da Equação 5.15 também são conhecidos. Desta forma, em ambos os casos, é possível obter uma função analítica para a pseudo-seção de choque de escape $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$. Observe que aplicações com diferentes arranjos, sejam geométricos ou de composição, terão pseudo-seção de choque de escape de nêutrons distintas.

Vale destacar que o intervalo de tempo Δt pode ser o tempo total de simulação Monte Carlo, desde que o problema seja estacionário, ou seja, durante a simulação a distribuição de nêutrons no domínio finito não varia com o tempo, o que implica que o número de fissões induzidas por nêutrons de uma dada geração deve ser o mesmo do número de fissões induzidas por nêutrons da geração prévia, isto é, o meio multiplicativo simulado deve estar operando com criticalidade ($k_{eff} = 1$).

Finalmente, um último resultado relevante no escape de nêutrons de domínios finitos pode ser obtido normalizando a razão entre o número de interações de escape e o número de interações integrais conforme a energia cinética do nêutron e a posição deste no interior do meio finito varia, fornecendo assim a função densidade de probabilidade de escape de um nêutron de acordo com a sua energia e a sua posição no espaço. Atenta-se para o fato de que tanto a densidade de probabilidade quanto a pseudo-seção de choque podem ser até quadridimensionais nesta abordagem.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, a precisão das parametrizações das seções de choque e o cálculo da pseudo-seção de choque de escape de nêutrons por meio da metodologia abordada anteriormente, bem como suas propriedades, serão apresentadas. Para isto, a simulação do transporte de nêutrons em um meio multiplicativo com domínio finito específico foi realizada.

6.1 Meio Multiplicativo Simulado

A aplicação simulada no presente trabalho consiste em um meio multiplicativo homogêneo e esférico de 76 *cm* de diâmetro composto por 72 % de água, que atua como moderador dos nêutrons rápidos, e 28 % de dióxido de urânio, que é o combustível. Além disso, o urânio presente no combustível é 2.5 % enriquecido, ou seja, 2.5 % do urânio no dióxido de urânio é composto pelo nuclídeo ^{235}U. O formato esférico do domínio finito foi escolhido por ser historicamente utilizado em estudos experimentais de criticalidade, já os parâmetros foram selecionados visando a obtenção desta criticalidade no meio simulado.

A população inicial de nêutrons utilizada na simulação foi de 20000 nêutrons, sendo que esta foi limitada pela capacidade de armazenamento do computador utilizado na simulação. Como será visto, este número implicou em algumas limitações para a obtenção da pseudo-seção de choque de escape de nêutrons, principalmente no domínio energético que caracteriza regiões de ressonância. Apesar disto, como abordado no Capítulo 1, o objetivo principal deste trabalho, em relação ao escape de nêutrons, é apresentar a metodologia para a construção da pseudo-seção de choque, de modo que a obtenção desta a partir da simulação é apenas uma exemplificação do uso da metodologia, sendo que para aplicações futuras, uma amostragem maior deve ser utilizada.

Na Figura 6.1, o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) para a presente aplicação é ilustrado como uma função das gerações de nêutrons no meio multiplicativo. Como pode ser visto, o k_{eff} fica em torno de 1 até a geração 45, o que implica que o meio multiplicativo está operando com criticalidade até este ponto, permitindo assim a aplicação da metodologia abordada no Capítulo 5 para a obtenção da pseudo-seção de choque de escape de nêutrons durante o intervalo de tempo que representa estas 45 gerações.

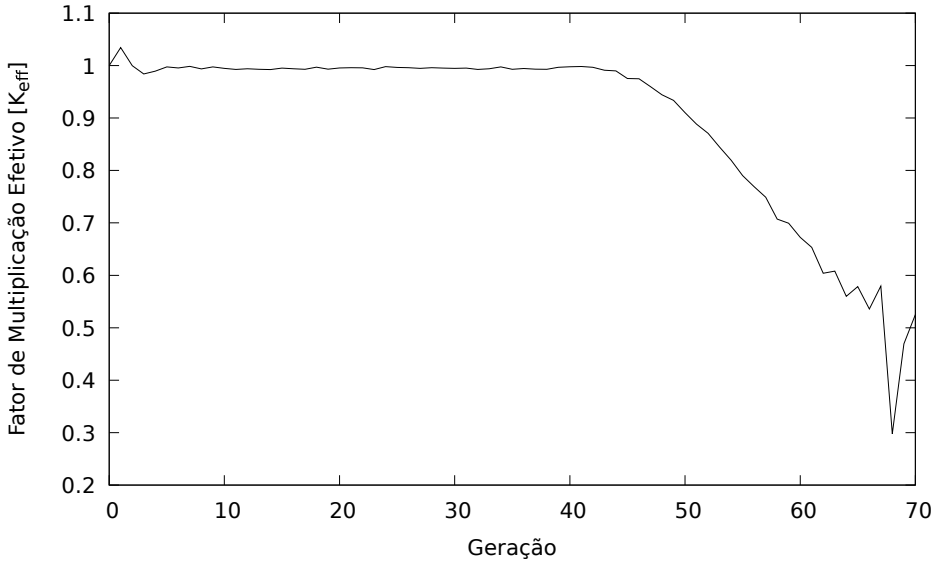
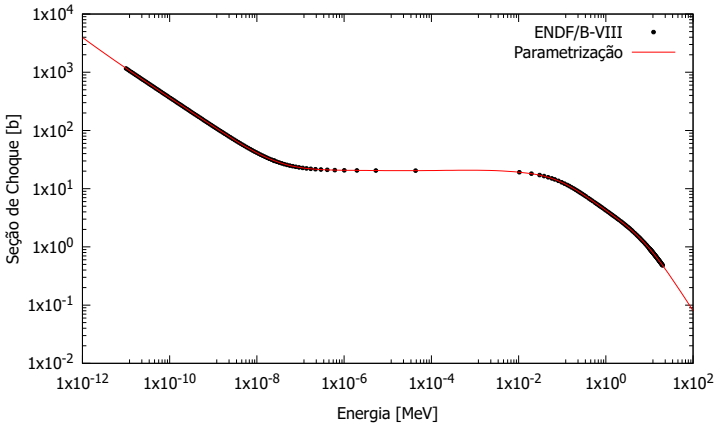


Figura 6.1 – Fator de multiplicação efetivo por geração.

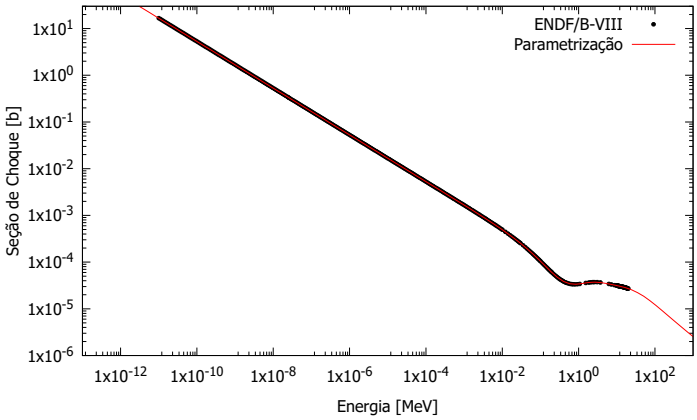
Antes de abordar a pseudo-seção de choque de escape propriamente dita, as parametrizações das seções de choque utilizadas nesta simulação serão apresentadas.

6.2 Parametrizações das Seções de Choque

As parametrizações das seções de choque de todos os nuclídeos utilizados na presente simulação são ilustradas nas figuras abaixo, sendo que estas fornecem uma comparação entre as curvas obtidas no processo de otimização e os dados das seções de choque microscópicas retirados da [Brown et al., 2018]. Destaca-se que as parametrizações foram realizadas visando um erro relativo médio menor que 2 %, sendo que este valor foi escolhido levando em conta o custo computacional requerido para o processo de otimização, bem como o tempo de simulação utilizando as funções analíticas no lugar das condicionais. No Apendice A, os gráficos contendo o erro relativo em função da energia são ilustrados para os respectivos nuclídeos usados na simulação.



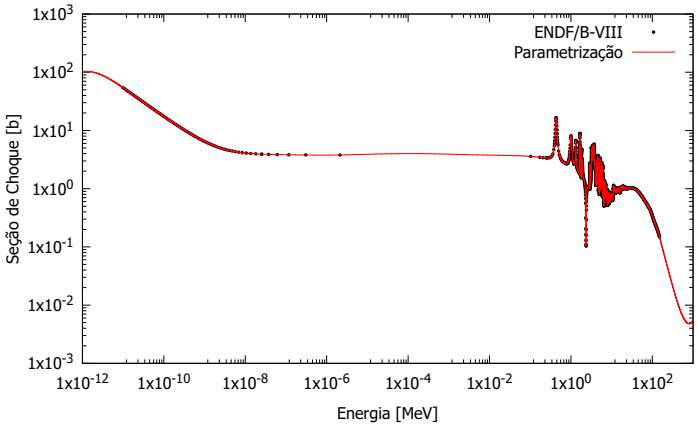
(a) Parametrização da seção de choque de espalhamento elástico.



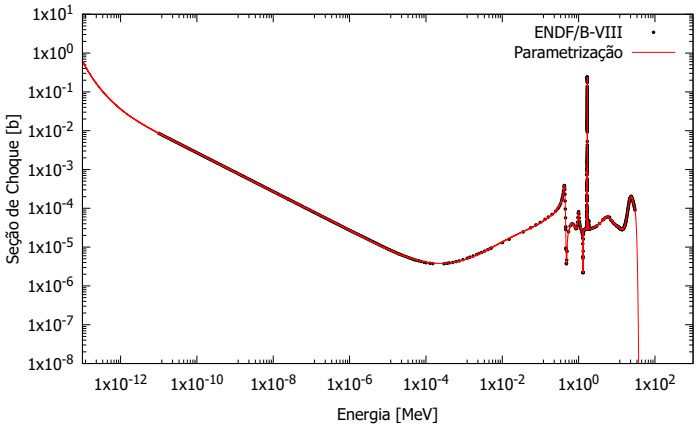
(b) Parametrização da seção de choque de captura radiativa.

Figura 6.2 – Parametrização das seções de choque do ^{1}H.

Na Figura 6.2, a parametrização das seções de choque do isótopo mais leve do hidrogênio, ^{1}H, é ilustrada. Em relação à seção de choque de captura radiativa, 1 função polinomial juntamente com 2 funções racionais foram utilizadas e forneceram um erro relativo médio de 0.13 %, enquanto que na seção de choque de espalhamento elástico, 1 função polinomial e 3 racionais foram suficientes para garantir um erro relativo médio de 0.11 %.



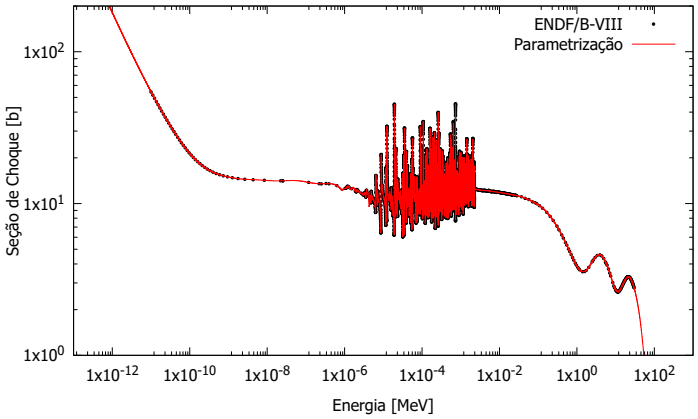
(a) Parametrização da seção de choque de espalhamento elástico.



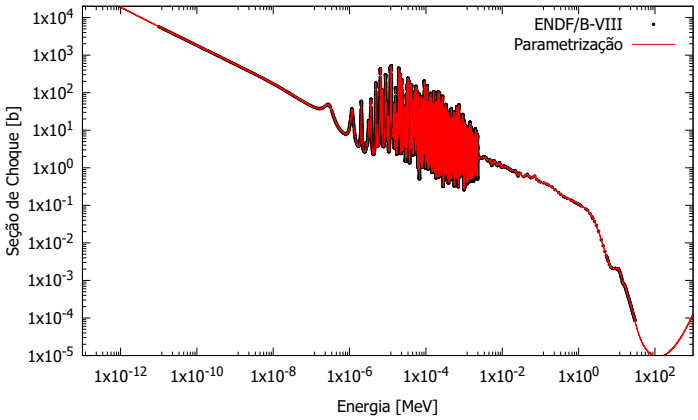
(b) Parametrização da seção de choque de captura radiativa.

Figura 6.3 – Parametrização das seções de choque do ^{16}O.

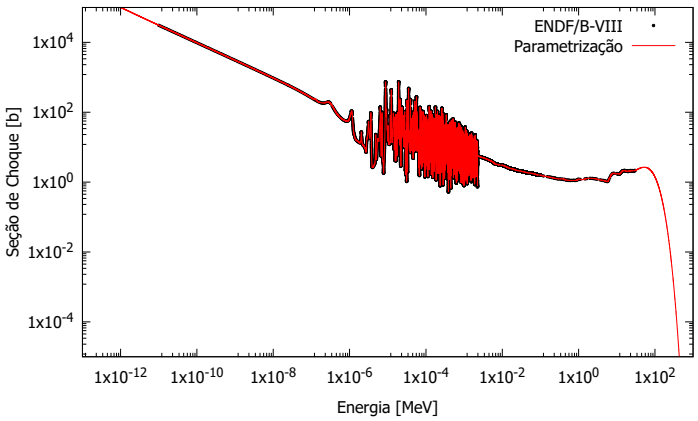
A Figura 6.3 ilustra as parametrizações para o nuclídeo ^{16}O. Em relação a seção de choque de captura radiativa, 3 funções de janela foram necessárias, uma vez que esta apresenta uma região de ressonância, além disso, foram utilizadas 4 funções polinomiais e 32 funções racionais de modo que o erro relativo médio ficou em 1.31 %. Para a seção de choque de espalhamento elástico, 3 funções de janela, juntamente com 2 funções polinomiais e 193 funções racionais garantiram um erro relativo médio de 0.32 %.



(a) Parametrização da seção de choque de espalhamento elástico.



(b) Parametrização da seção de choque de captura radiativa.



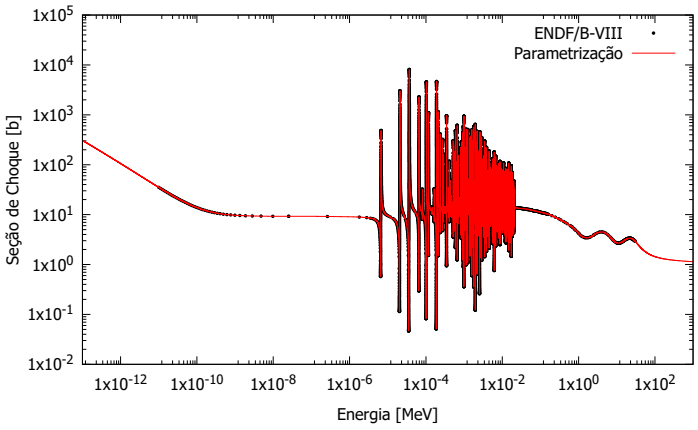
(c) Parametrização da seção de choque de fissão.

Figura 6.4 – Parametrização das seções de choque do ^{235}U.

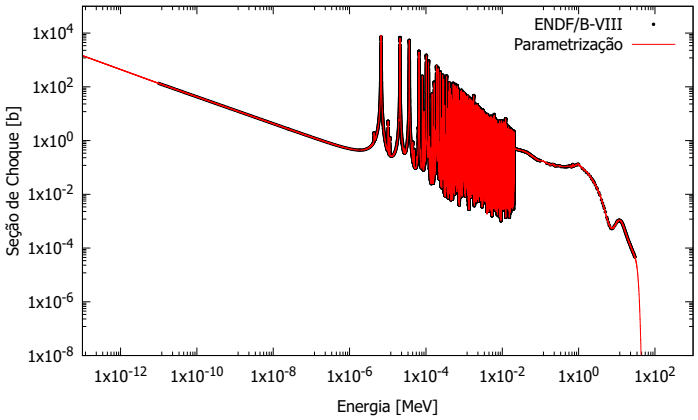
As parametrizações das seções de choque do isótopo de urânio ^{235}U são ilustradas

na Figura 6.4. Para a seção de choque de captura radiativa, 10 funções de janela foram necessárias, devido a densidade de ressonâncias na região epidérmica do espectro energético, além disso, 6 funções polinomiais e 1923 funções racionais permitiram obter um erro relativo médio de 1.44 %. Para a captura radiativa, o domínio foi dividido em 7 regiões, implicando no uso de 7 funções de janela, além de apenas 2 funções polinomiais e 1568 funções racionais, de modo que o erro relativo médio ficou em 0.368 %. Por fim, para a seção de choque de fissão, um erro relativo médio de 1.55 % foi obtido através de 8 funções de janela, 3 funções polinomiais e 2016 funções racionais.

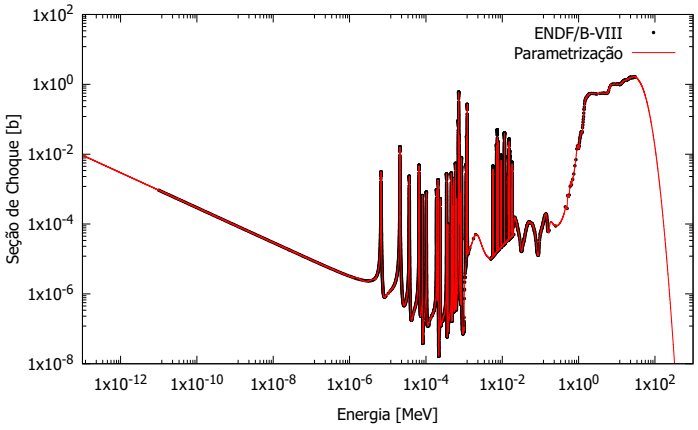
As últimas parametrizações necessárias para realizar a simulação se referem as seções de choque do isótopo de urânio ^{238}U, conforme expostas na Figura 6.5. A seção de choque de captura radiativa deste isótopo foi a que mais demandou funções para uma parametrização precisa, sendo que 22 funções de janela, 4 funções polinomiais e 6781 funções racionais foram utilizadas para obter um erro relativo médio de 1.98 %, destaca-se que esta seção de choque possui mais de 212000 dados. Em relação a seção de choque de fissão, 4 funções de janela, 3 polinomiais e 410 racionais foram necessárias para garantir um erro relativo médio de 1.65 %. Finalmente, para a seção de choque de espalhamento elástico do ^{238}U, 11 funções de janela dividiram o domínio energético em subdomínios, enquanto que 3 funções polinomiais e 3728 funções racionais parametrizaram toda a seção de choque de modo que o erro relativo médio para este caso foi de 0.57 %.



(a) Parametrização da seção de choque de espalhamento elástico.



(b) Parametrização da seção de choque de captura radiativa.



(c) Parametrização da seção de choque de fissão.

Figura 6.5 – Parametrização das seções de choque do ^{238}U.

Implementando estas funções analíticas que parametrizam as seções de choque no

código, foi possível simular a aplicação detalhada na primeira seção deste capítulo. Na Figura 6.6, o fluxo de nêutrons por energia normalizado no interior do meio multiplicativo simulado é ilustrado considerando um comportamento médio nas regiões de ressonâncias. O fluxo espectral obtido indica que a simulação está de acordo para o problema simulado, sendo que é possível observar as distribuições de nêutrons rápidos, térmicos e a intermediária, que segue aproximadamente uma lei de potência, como esperado.

Por ser um indicativo de que a simulação está de fato representando adequadamente o transporte de nêutrons dentro no meio finito simulado, o fluxo espectral foi utilizado para comparar os resultados obtidos para a presente aplicação utilizando as seções de choque parametrizadas por meio de funções analíticas, obtidas e implementadas nesta dissertação, com os resultados obtidos através do uso das seções de choque interpoladas e implementadas através de funções condicionais, já presentes no simulador. Como esperado, observa-se também na Figura 6.6 que o fluxo obtido através das duas abordagens é praticamente o mesmo em todo o espectro energético, o que indica que as funções analíticas que parametrizam as seções de choque são tão precisas quanto as interpolações e podem substituir estas.

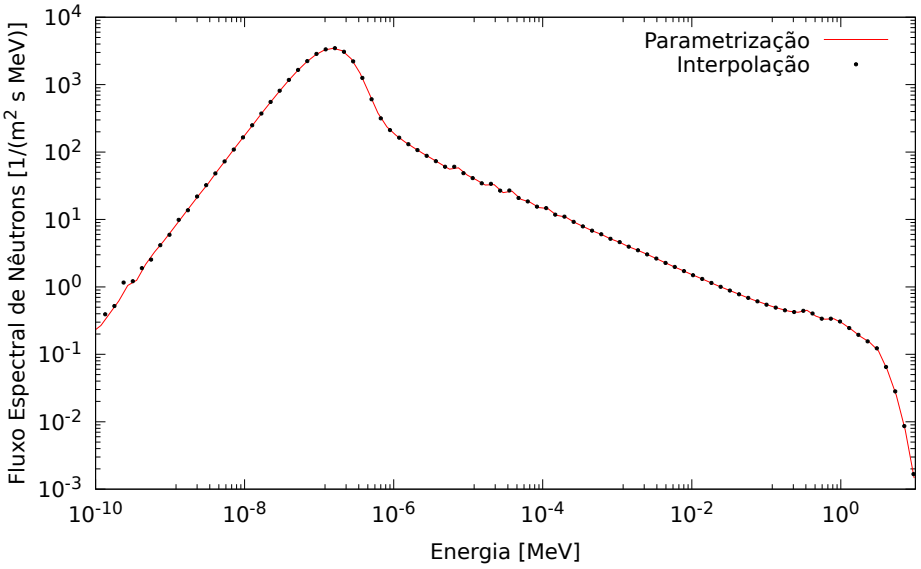


Figura 6.6 – Fluxo espectral de nêutrons.

Uma vez parametrizadas, as seções de choque microscópicas podem ser utilizadas para a obtenção da pseudo-seção de choque de escape de nêutrons utilizando a metodologia descrita no Capítulo 5.

6.3 Cálculo da Pseudo-Seção de Choque de Escape Para o Caso Específico

Por ser uma primeira abordagem e para facilitar o cálculo de $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$, será considerado que o número de interações por unidade de volume e de energia $N_z(\mathbf{r}, E)$ e $N_y(\mathbf{r}, E)$ são separáveis de tal forma que a Equação 5.15 pode ser utilizada.

Como comentado no capítulo anterior, todos os termos do lado direito desta equação podem ser obtidos sendo que o único termo que não depende diretamente da simulação é a seção de choque macroscópica total do meio, ou seja, $\Sigma_t(E)$. Como já mencionado no Capítulo 3, para o simulador utilizado, tem-se $\Sigma_t(E) = \Sigma_f(E) + \Sigma_e(E) + \Sigma_\gamma(E)$. Com base nas parametrizações das seções de choque microscópicas dos nuclídeos que compõem o meio multiplicativo em questão, ilustradas acima, é possível obter $\Sigma_t(E)$ através de uma função analítica conforme Figura 6.7.

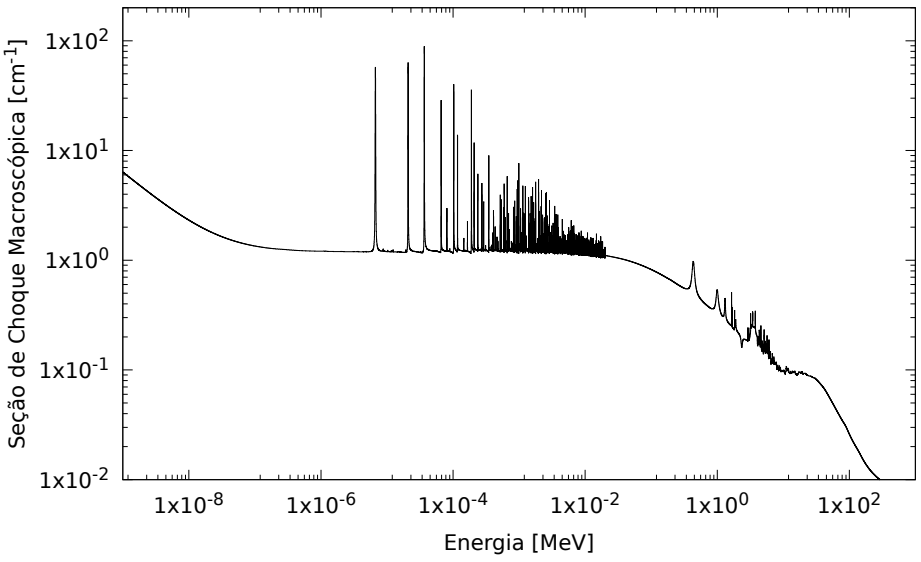


Figura 6.7 – Seção de choque macroscópica total do meio.

Observa-se que as ressonâncias presentes nas seções de choque microscópicas, principalmente nos isótopos de urânio, implicam em ressonâncias na seção de choque total do meio, o que é esperado, uma vez que esta é composta pelas seções de choque microscópicas. A região de ressonâncias em torno de 1 MeV é oriunda principalmente da seção de choque de espalhamento elástico do oxigênio, porém, estas representam um valor mais baixo da seção de choque quando comparadas às ressonâncias da região epitérmica.

Os outros quatro termos necessários para encontrar a pseudo-seção de choque de escape são as funções de densidade que dependem da posição de interação no espaço e da

energia do nêutron. A Figura 6.8 ilustra o número de interações por unidade de volume, sejam estas de escape ($n_{z_r}(\mathbf{r})$) ou integrais ($n_{y_r}(\mathbf{r})$), obtidas na simulação, representadas por pontos e posteriormente parametrizadas via funções analíticas representadas pelas linhas azul e vermelha. O gráfico está em escala linear e apenas interações que ocorreram em um raio maior que 26 cm foram consideradas, uma vez que praticamente nem um nêutron escapou do domínio nas regiões mais centrais da esfera, além disso, tanto nesta quanto nas outras figuras que representam funções de densidade, a função é nula fora do domínio de interesse.

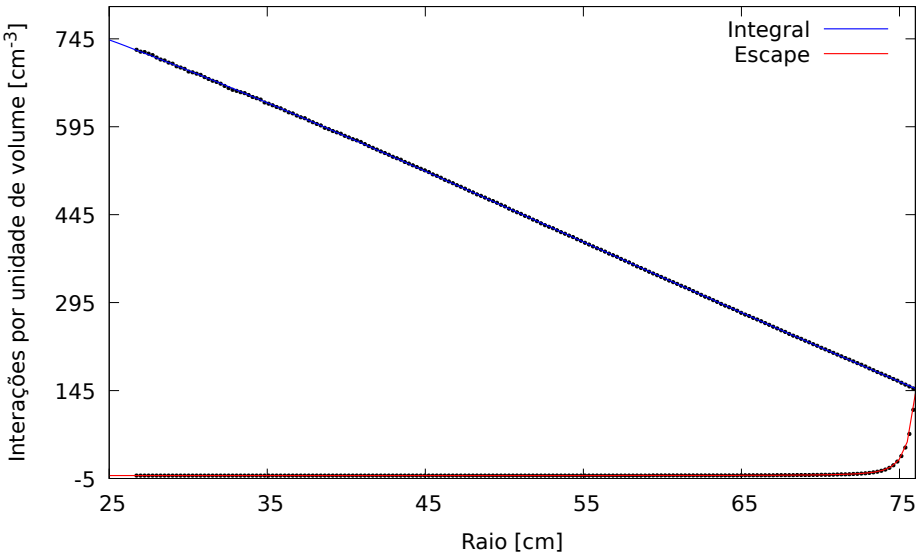


Figura 6.8 – Número de interações por unidade de volume ($n_{z_r}(\mathbf{r})$ e $n_{y_r}(\mathbf{r})$).

É possível observar que o número de interações de escape é muito baixo e praticamente constante até aproximadamente 70 cm, de modo que a partir deste ponto, que é bem próximo das paredes do meio finito, ocorre um crescimento exponencial de tal forma que quanto mais próximo da parede, mais o número de interações de escape se aproxima do número de interações integrais no domínio. Isto indica que a razão $\frac{n_{z_r}(\mathbf{r})}{n_{y_r}(\mathbf{r})}$ tende a um quando $\mathbf{r}$ tende ao raio que limita o meio multiplicativo finito, neste caso, 76 cm.

As outras duas funções necessárias para a Equação 5.15, que representam o número de interações por unidade de energia, são ilustradas na Figura 6.9. Novamente, os pontos representam as contagens obtidas por meio das simulações e as linhas azul e vermelha representam a função analítica que parametriza estes pontos e que é utilizada na obtenção da pseudo-seção de choque.

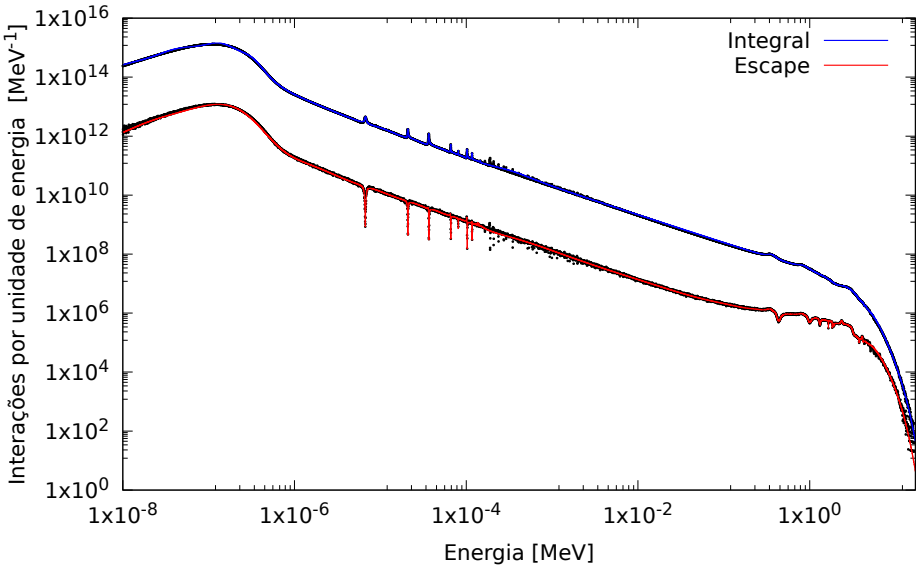


Figura 6.9 – Número de interações por unidade de energia ($n_{z_E}(E)$ e $n_{y_E}(E)$).

Percebe-se que as distribuições do número de interações de escape e do número de interações integrais por unidade de energia possuem, no geral, o mesmo comportamento, exceto pelo fato de que o número de interações integrais é maior, o que é óbvio, uma vez que estas incluem as interações de escape. Além disso, ao longo do espectro energético, a ordem de magnitude do número de pseudo-interações de escape varia entre 1 e 10 % da ordem de magnitude das interações integrais, o que é um comportamento esperado para este tipo de meio multiplicativo.

Outra característica que pode ser observada é referente aos picos presentes nas distribuições. Em relação as interações integrais, estes picos representam um aumento significativo no número de interações em determinados pontos do espectro energético e são uma consequencia direta das ressonâncias presentes na seção de choque macroscópica total do meio, conforme Figura 6.7. Em contrapartida, para o escape, picos na direção oposta aparecem nos mesmos pontos do espectro energético, ou seja, estes picos representam uma diminuição significativa no número de interações de escape, o que também é uma consequência direta de $\Sigma_t(E)$.

Como comentado no início do capítulo, a amostra inicial de nêutros relativamente pequena implicou em duas limitações com relação ao número de interações por unidade de energia. A primeira é que, observando a seção de choque macroscópica total na Figura 6.7, percebe-se um número muito maior de ressonâncias do que na Figura 6.9, que fornece o

número de interações por unidade de energia. De fato, estas ressonâncias devem implicar em picos no número de interações por unidade de energia, já que representam um aumento na probabilidade de interação real, porém, este é um efeito de utilizar uma população de nêutrons inicial baixa. Apesar de fornecer, na média, o fluxo de nêutrons no meio de forma precisa, conforme ilustrado na Figura 6.6, esta população inicial não é grande o suficiente para obter um comportamento mais preciso do número de interações nas regiões de ressonâncias presentes na seção de choque total do meio, por este motivo, apenas algumas destas ressonâncias são claramente definidas nas distribuições do número de interações de modo que apenas estas podem ser parametrizadas no processo de otimização.

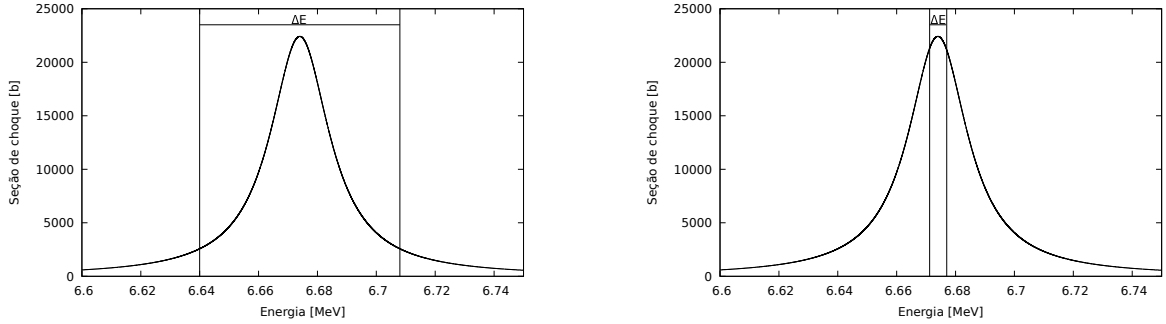
Por exemplo, na região mais densa de ressonâncias, onde ocorrem sobreposições destas, a partir de aproximadamente $1.5 \times 10^{-4}\ MeV$ até $0.02\ MeV$, as contagens obtidas da simulação se tornam esparsas e não é mais possível parametrizar os picos de forma precisa, desta forma, a parametrização foi feita com base no comportamento médio para esta região. O mesmo vale para as ressonâncias oriundas do ^{16}O em energias mais altas, sendo que algumas destas em torno de 1 MeV podem ser reconhecidas no processo de otimização.

A segunda limitação é oriunda do tamanho consideravelmente grande dos incrementos de energia ΔE utilizados para a obtenção das contagens de tal forma que os picos observados na Figura 6.9 deveriam ser maiores para as interações integrais e consequentemente menores para as interações de escape. Isto ocorre pois a contagem do número de interações em um determinado incremento ΔE é influenciada por regiões do espectro energético com diferentes valores de seção de choque. Observe que esta limitação tem um maior efeito na região de ressonâncias, pois dado um ΔE, a contagem das interações neste é influenciada por regiões com elevadas seções de choque e regiões vizinhas nas quais a seção de choque diminui consideravelmente. Na Figura 6.10, este efeito é ilustrado ao comparar dois incrementos de energia de tamanhos distintos em torno de uma ressonância isolada.

Note ainda na Figura 6.10 que diminuindo suficientemente o ΔE, é possível minimizar estes efeitos. Porém, vale destacar que diminuindo os incrementos que formam o espaço de fase para realizar as contagens na tentativa de mitigar as limitações implica em erros esatísticos muito grandes nas contanges nos respectivos intervalos, uma vez que o número de histórias simuladas não foi grande o suficiente, conforme abordado no Capítulo

5 e no início desta seção.

Com isto, para a obtenção da pseudo-seção de choque, a seção de choque macroscópica total do meio precisa ser corrigida de alguma forma, pois a função, conforme ilustrada na Figura 6.7, não leva em conta estes efeitos oriundos da baixa amostra de histórias simuladas.



(a) ΔE grande. (b) ΔE pequeno.

Figura 6.10 – Limitação devido ao ΔE.

Para lidar com estas limitações, primeiramente, nas regiões onde o número de contagens por unidade de energia foram parametrizados considerando a média dos dados, já que as ressonâncias não podem ser reconhecidas, o mesmo procedimento foi feito na função que parametriza a seção de choque total do meio, isto é, para estas regiões, a pseudo-seção de choque foi criada com base na média da seção de choque macroscópica total do meio.

Além disso, para cada ΔE que compõem o espaço de fase, a média da seção de choque no intervalo foi obtida através da integração da função analítica que representa a seção de choque macroscópica total do meio, considerando como limites de integração os limites de cada intervalo ΔE. Uma vez que a função é analítica, o procedimento de integração é simples e rápido. Desta forma, as limitações impostas pelo baixo número inicial de nêutrons podem ser contornadas e a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons pode ser obtida para a aplicação em questão baseada em uma aproximação da seção de choque macroscópica total do meio. A Figura 6.11 representa esta aproximação.

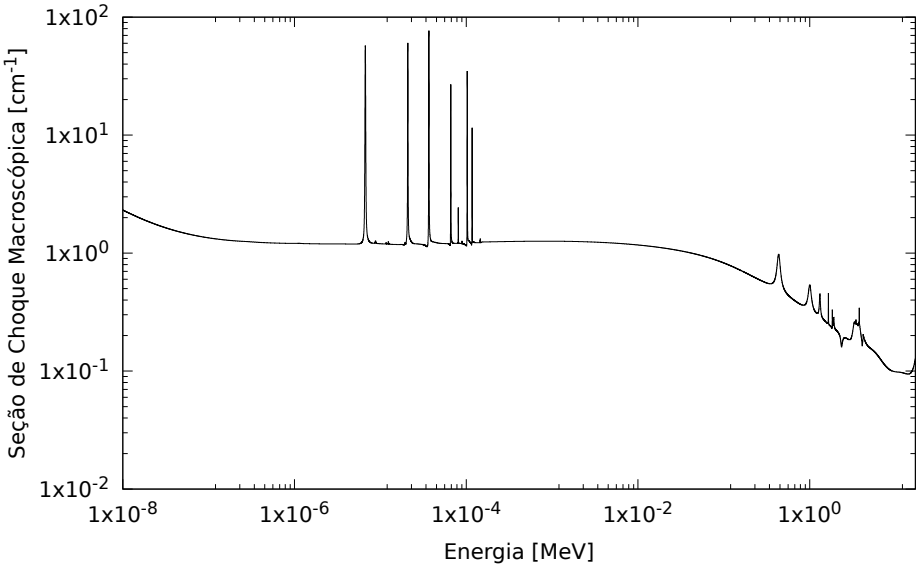


Figura 6.11 – Aproximação da seção de choque macroscópica total do meio.

Note que este procedimento não precisa ser realizado caso uma população inicial de nêutrons grande o suficiente para que o ΔE possua um tamanho aceitável seja utilizado, neste caso, a seção de choque macroscópica total do meio conforme ilustrado na Figura 6.7 pode ser aplicada na Equação 5.15. Destaca-se que um estudo neste sentido ainda precisa ser realizado, mas espera-se que uma população na ordem de 10^6 seja suficiente.

Antes de apresentar a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons, com base no número de interações por unidade energia e de volume, é possível construir a probabilidade de escape de nêutrons do meio multiplicativo finito em questão, conforme a posição e a energia do nêutron varia. A Figura 6.12 ilustra a função densidade de probabilidade associada ao escape de nêutrons, sendo que o eixo da energia está em escala logarítmica enquanto que o eixo do raio está em escala linear.

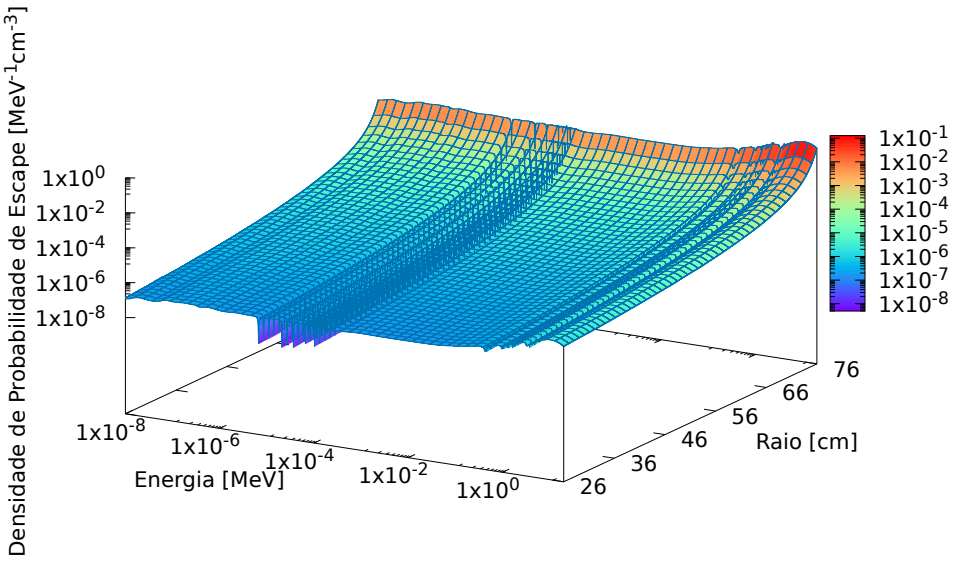


Figura 6.12 – Função densidade de probabilidade de escape.

Observa-se que a probabilidade de escape aumenta conforme o nêutron se aproxima das superfícies do domínio finito e conforme a energia cinética deste aumenta, sendo que ambos os resultados são esperados. Além disso, a probabilidade de escape diminui muito para nêutrons cuja energia cinética corresponda com a energia de alguma das ressonâncias presentes na seção de choque macroscópica total do meio, como pode ser aferido nos picos para baixo na função densidade de probabilidade de escape. Este resultado também é esperado, pois nestes picos a probabilidade de uma interação real ocorrer dentro do domínio aumenta consideravelmente, o que diminui as chances do respectivo nêutron escapar, o que explica também os picos representando um aumento ou uma diminuição no número de interações por unidade de energia, na Figura 6.9.

O último resultado é finalmente a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons. Ilustrada na Figura 6.13, observa-se que os picos permanecem nesta uma vez que esta depende diretamente da seção de choque macroscópica do meio e da probabilidade de escape. Efetivamente, espera-se que os picos diminuam a pseudo-seção de choque de escape, porém alguns estão implicando em um pequeno aumento desta, o que também deve ter relação com a amostragem inicial de nêutrons e o procedimento para lidar com esta limitação. Outra explicação são fatores de anti-correlação entre as ressonâncias elevando e as ressonâncias diminuindo as funções de densidade. De qualquer forma, o comportamento global da pseudo-seção também está conforme o esperado.

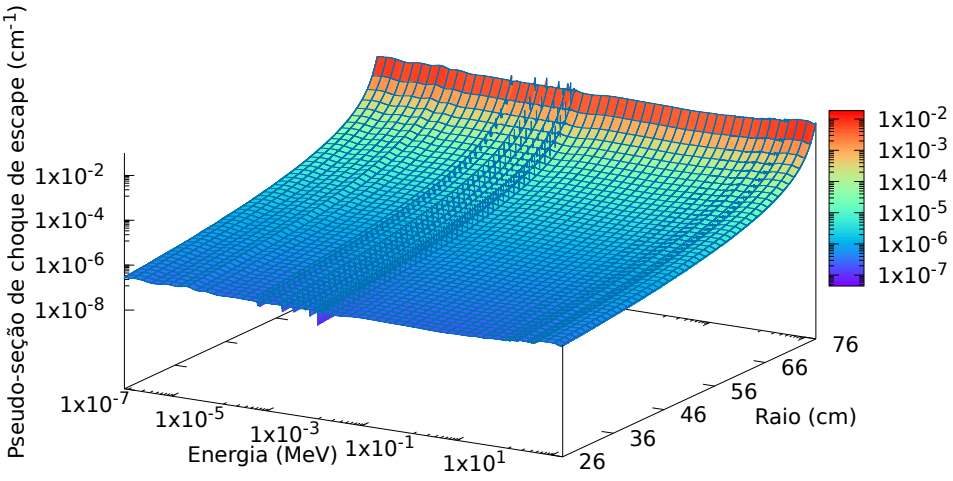


Figura 6.13 – Pseudo-seção de choque de escape em função da energia e da posição do nêutron.

6.4 Propriedades e Aplicações da Pseudo-Seção de Choque de Escape

A principal ideia em utilizar a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons é interpretar o escape de forma análoga à uma interação de absorção, porém fora do domínio finito de interesse, neste sentido, o escape tem a mesma característica de uma interação real e pode ser quantificada através da seção de choque associada, no caso, a pseudo-seção de choque de escape.

Observe que nêutrons que se aproximam e interagem nas proximidades das superfícies do domínio finito tendem a escapar deste, implicando que praticamente toda a interação, salvo alguns espalhamentos que redirecionam o nêutron para dentro do domínio finito, é de escape. Isto pode ser observado na Figura 6.8, quando a razão entre o número de interações de escape e integrais tende a um conforme a análise se aproxima do raio do meio multiplicativo. Desta forma, a partir da Equação 5.2, tem-se

$$\frac{N_z(\mathbf{r},E)}{N_y(\mathbf{r},E)} \to 1 \implies \Sigma_z(\mathbf{r},E) \to \infty \tag{6.1}$$

Com base nesta propriedade, é possível utilizar a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons em abordagens determinísticas e estocásticas considerando inicialmente domínios infinitos de tal forma que a própria pseudo-seção tratará dos contornos finitos

do meio estudado. A aplicação da pseudo-seção de choque pode ser feita da mesma forma que a seção de choque de absorção é aplicada, seja diretamente na equação de transporte para métodos determinísticos, ou no processo aleatório de escolha do tipo de interação para métodos estocásticos.

Como vantagens, em métodos estocásticos como o Monte Carlo físico, isto implica em uma redução do número de passos nas simulações, já que o último passo dos nêutrons que escapam não seria necessário, diminuindo assim o número de operações realizadas na simulação, como por exemplo, não é mais necessário checar se o nêutron está dentro ou não do domínio finito de interesse. Em métodos determinísticos, isto implica na não necessidade de condições de contorno de fluxo de nêutrons nas superfícies do meio finito de interesse, como por exemplo um reator nuclear, além de lidar com o escape de forma precisa, sem aproximações de fluxo zero nas paredes ou nas distâncias de extrapolação.

Note que apesar de ser necessária uma simulação prévia para a obtenção da pseudo-seção de choque de escape de nêutrons, simulações de problemas reais podem demandar uma ordem de grandeza de pelo menos $\times 10^9$ nêutrons iniciais, e como comentado anteriormente, espera-se que com uma ordem de $\times 10^6$ nêutrons iniciais seja possível criar a respectiva pseudo-seção de choque de forma satisfatória. Sendo assim, esta poderia ser utilizada na simulação das partículas restantes, aumentando a eficiência computacional.

7 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

No presente trabalho, duas contribuições no estudo de transporte de nêutrons foram realizadas. A primeira se refere a parametrização das seções de choque nucleares por meio de funções analíticas de modo que sua implementação em um código de simulação de problemas envolvendo o transporte de nêutrons por meio do método Monte Carlo físico foi realizada. Além de serem fáceis de implementar e manipular, as funções analíticas descrevendo as seções de choque podem ser utilizadas para outros fins, como foram utilizadas no presente trabalho para obter a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons através de uma única funções analítica, ou ainda, como por exemplo, em abordagens analíticas ou na validação das equações que descrevem o transporte de nêutrons, já que calcular integrais de funções analíticas é uma tarefa relativamente simples.

Para avaliar a precisão das parametrizações em relação as interpolações já implementadas no programa, uma simulação envolvendo um problema de criticalidade foi realizada de modo que os resultados obtidos quando as seções de choque utilizadas no processo foram parametrizadas via funções analíticas são praticamente os mesmos resultados que os obtidos quando as seções de choque são dadas por meio de interpolações lineares, o que é esperado, já que o erro relativo médio nas parametrizações quando comparadas aos dados experimentais das seções de choque ficou abaixo de 2%.

Ainda com respeito as parametrizações, como trabalho futuro, é possível aprimorar o algoritmo que realiza o processo de otimização visando o uso de um menor número de funções de janela, diminuindo assim as operações matemáticas que compõem cada função final que parametriza a respectiva seção de choque.

Na segunda contribuição deste trabalho, uma nova abordagem para tratar problemas de transporte de nêutrons que envolvam o escape destes de domínios finitos foi apresentada por meio da derivação de uma pseudo-seção de choque de escape de nêutrons de modo que o escape pode ser tratado da mesma forma que uma interação física.

Além disto, com o cálculo da pseudo-seção de choque de escape para um caso específico, algumas características globais puderam ser verificadas, apesar da necessidade de utilizar uma maior população inicial de nêutrons, como por exemplo, $\times 10^6$ nêutrons, para que os incrementos que formam o espaço de fase possam ser diminuídos, permitindo assim um maior e mais preciso detalhamento da influência das ressonâncias nas funções de

densidade e, após a parametrização destas via funções analíticas, no escape de nêutrons de meios finitos através de $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$.

Mesmo com as limitações apresentadas, a presente aproximação para a pseudo-seção de choque de escape de nêutrons através do uso de médias nos intervalos espaciais e de energia claramente mostrou as perspectivas de $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$ de tal forma que, para futuras simulações empregando uma maior capacidade computacional, é possível utilizar a concepção da pseudo-seção de choque não somente para aprimorar o estudo de escape, mas também para facilitar e simplificar cálculos e simulações envolvendo o transporte de nêutrons em domínios finitos, tanto em aproximações estocásticas quanto determinísticas.

Com relação ao escape, para trabalhos futuros, é possível aprimorar a metodologia para a obtenção da pseudo-seção de choque de escape de nêutrons através da consideração de problemas não estacionários e considerar ainda a dependência da direção de movimento dos nêutrons, de tal forma que $\Sigma_z(\mathbf{r}, E)$ se torne mais generalizada, permitindo a aplicação desta em um maior número de situações. Finalmente, destaca-se que esta é uma primeira abordagem no estudo de transporte de nêutrons através de uma pseudo-seção de choque de escape e que outras propriedades e aplicações em diferentes áreas de estudo, como transporte de outros tipos de partículas, podem ser derivadas desta aproximação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., Asai, M., Axen, D., Banerjee, S., Barrand, G., Behner, F., Bellagamba, L., Boudreau, J., Broglia, L., Brunengo, A., Burkhardt, H., Chauvie, S., Chuma, J., Chytracek, R., Cooperman, G., Cosmo, G., Degtyarenko, P., Dell'Acqua, A., Depaola, G., Dietrich, D., Enami, R., Feliciello, A., Ferguson, C., Fesefeldt, H., Folger, G., Foppiano, F., Forti, A., Garelli, S., Giani, S., Giannitrapani, R., Gibin, D., Gómez Cadenas, J. J., González, I., Gracia Abril, G., Greeniaus, G., Greiner, W., Grichine, V., Grossheim, A., Guatelli, S., Gumplinger, P., Hamatsu, R., Hashimoto, K., Hasui, H., Heikkinen, A., Howard, A., Ivanchenko, V., Johnson, A., Jones, F. W., Kallenbach, J., Kanaya, N., Kawabata, M., Kawabata, Y., Kawaguti, M., Kelner, S., Kent, P., Kimura, A., Kodama, T., Kokoulin, R., Kossov, M., Kurashige, H., Lamanna, E., Lampén, T., Lara, V., Lefebure, V., Lei, F., Liendl, M., Lockman, W., Longo, F., Magni, S., Maire, M., Medernach, E., Minamimoto, K., Mora de Freitas, P., Morita, Y., Murakami, K., Nagamatu, M., Nartallo, R., Nieminen, P., Nishimura, T., Ohtsubo, K., Okamura, M., O'Neale, S., Oohata, Y., Paech, K., Perl, J., Pfeiffer, A., Pia, M. G., Ranjard, F., Rybin, A., Sadilov, S., Di Salvo, E., Santin, G., Sasaki, T., Savvas, N., Sawada, Y., Scherer, S., Sei, S., Sirotenko, V., Smith, D., Starkov, N., Stoecker, H., Sulkimo, J., Takahata, M., Tanaka, S., Tcherniaev, E., Safai Tehrani, E., Tropeano, M., Truscott, P., Uno, H., Urban, L., Urban, P., Verderi, M., Walkden, A., Wander, W., Weber, H., Wellisch, J. P., Wenaus, T., Williams, D. C., Wright, D., Yamada, T., Yoshida, H., e Zschiesche, D. Geant4—a simulation toolkit, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, vol. 506, p. 250–303, 2003.

Barcellos, L. F. F. C., Bodmann, B. E. J., de Queiroz Bogado Leite, S., e de Vilhena, M. T. **A Monte Carlo Simulation of a Simplified Reactor by Decomposition of the Neutron Spectrum into Fission, Intermediate and Thermal Distributions**. In nternational Nuclear Atlantic Conference 2015, São Paulo, 2015.

Barcellos, L. F. F. C. **On a Continuous Energy Monte Carlo Simulator for Neutron Interactions in Reactor Core Material Considering Up-Scattering Effects in the Thermal Energy Region**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.

Barcellos, L. F. F. C. **Monte Carlo Simulator Project for Neutron Transport with Continuous Energy: Shielding, Criticality and Spectral Angular Neutron Flux Analysis**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2021.

Barcellos, L. F. F. C., Bodmann, B. E. J., e de Vilhena, M. T. On a comparison of a neutron Monte Carlo transport simulation to a criticality benchmark experiment, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 134, p. 103652, 2021a.

Barcellos, L. F. F. C., Bodmann, B. E. J., de Queiroz Bogado Leite, S., e de Vilhena, M. T. A Continuous Energy Neutron Transport Monte Carlo Simulator Project: Decomposition of the Neutron Energy Spectrum by Target Nuclei Tagging, **Brazilian Journal of Radiation Sciences**, vol. 08(03B), p. 01–12, 2021b.

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

Brown, D. A., Chadwick, M. B., Capote, R., Kahler, A. C., Trkov, A., Herman, M. W., Sonzogni, A. A., Danon, Y., Carlson, A. D., Dunn, M., Smith, D. L., Hale, G. M., Arbanas, G., Arcilla, R., Bates, C. R., Beck, B., Becker, B., Brown, F., Casperson, R. J., Conlin, J., Cullen, D. E., Descalle, M. -A., Firestone, R., Gaines, T., Guber, K. H., Hawari, A. I., Holmes, J., Johnson, T. D., Kawano, T., Kiedrowski, B. C., Koning, A. J., Kopecky, S., Leal, L., Lestone, J. P., Lubitz, C., Márquez Damián J. I., Mattoon, C. M., McCutchan, E. A., Mughabghab, S., Navratil, P., Neudecker, D., Nobre, G. P. A., Noguere, G., Paris, M., Pigni, M. T., Plompen, A. J., Pritychenko, B., Pronyaev, V. G., Roubtsov, D., Rochman, D., Romano, P., Schillebeeckx, P., Simakov, S., Sin, M., Sirakov, I., Sleaford, B., Sobes, V., Soukhovitskii, E. S., Stetcu, I., Talou, P., Thompson, I., van der Marck, S., Welser-Sherrill, L., Wiarda, D., White, M., Wormald, J. L., Wright, R. Q., Zerkle, M., Žerovnik, G., e Zhu, Y. ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data, **Nuclear Data Sheets**, vol. 148, p. 1–142, 2018.

Brun, E., Damian, F., Diop, C. M., Dumonteil, E., Hugot, F. X., Jouanne, C., Lee, Y. K., Malvagi, F., Mazzolo, A., Petit, O., Trama, J. C., Visonneau, T., e Zoia, A. TRIPOLI-4, CEA, EDF and AREVA reference Monte Carlo code, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 82, p. 151–160, 2015.

de Camargo, D. Q. **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.

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

Carter, L. L. e Cashwell, E. D. **Particle-Transport Simulation with the Monte Carlo Method**. National Technical Information Service, Springfield, 1975.

Conway, J. B. **Functions of One Complex Variable**. Springer-Verlag, New York, 1978.

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

Fernandes, J. C. L., Bodmann, B. E. J., e de Vilhena, M. T. On multi-group neutron transport in planar one dimensional geometry: A solution for a localized pulsed source, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 101, p. 552–558, 2017.

Gavin, H. P. **The Levenberg-Marquardt algorithm for nonlinear least squares curve-fitting problems**. `https://people.duke.edu/~hpgavin/ce281/lm.pdf`, Duke University, 2020, Acesso em: 10-10-2020.

Heath, M. T. **Scientific Computing:An Introductory Survey**. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2018.

Jeong, J., White, N. E., e Loyalka, S. K. Three-dimensional transport theory: Evaluation of analytical expressions of Williams and verification of MCNP, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 86, p. 80–87, 2015.

Kalos, M. H. e Whitlock, P. A. **Monte Carlo Methods**. Wiley-VCH, Weinheim, 2004.

Lamarsh, J. R. **Introduction to Nuclear Reactor Theory**. Addison-Wesley Publishing Company, Boston, 1966.

Larsen, E. W. **An Overview of Neutron Transport Problems and Simulation Techniques**. In Graziani, F., Barth, T. J., Griebel, M., Keyes, D. E., Nieminen, R. M., Roose, D., e Schlick, T., editors, Computational Methods in Transport, Springer, The Netherlands, 2006.

Leppänen, J., Pusa, M., Viitanen, T., Valtavirta, V., e Kaltiaisenaho, T. The Serpent Monte Carlo code: Status, development and applications in 2013, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 82, p. 142–150, 2015.

Lewis, I. E. e Miller, Jr, W. F. **Computational Methods of Neutron Transport**. John Wiley & Sons, New York, 1984.

Madsen, K., Nielsen, H. B., e Tingleff, O. **Methods for Non-linear Least Squares Problems**. Informatics and Mathematical Modelling, Technical University of Denmark, DTU, Denmark, 2004.

Markwardt, C. B. **Non-linear Least Squares Fitting in IDL with MPFIT**. In Bohlender, D., Dowler, P., e Durand, D., editors, Astronomical Data Analysis Software and Systems XVIII, ASP Conference Series, San Francisco, 2009.

Meghreblian, R. V. e Holmes, D. K. **Reactor Analysis**. McGraw-Hill Book Company, New York, 1960.

Meyerhof, W. E. **Elements of Nuclear Physics**. McGraw-Hill Book Company, New York, 1967.

Oliveira, F. R., Bodmann, B. E. J., de Vilhena, M. T., e Carvalho, F. On an analytical formulation for the mono-energetic neutron space-kinetic equation in full cylinder symmetry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 99, p. 253–257, 2017.

Oliveira, F. R., Fernandes, J. C. L., Bodmann, B. E. J., e de Vilhena, M. T. On an analytical solution for the two energy group neutron space-kinetic equation in heterogeneous cylindrical geometry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 133, p. 216–220, 2019.

Petrie, L. M. e Cross, N. F. **KENO IV: An Improved Monte Carlo Criticality Program**. Oak Ridge National Laboratory, Tennessee, 1975.

Pouryavi, M., Masoudi, S. F., e Rahmani, F. Radiation shielding design of BNCT treatment room for D-T neutron source, **Applied Radiation and Isotopes**, vol. 99, p. 90–96, 2015.

Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., e Flannery, B. P. **Numerical recipes in C: the art of scientific computing**. Cambridge University Press, Cambridge, 1992.

Richards, S. D., Baker, C. M. J., Bird, A. J., Cowan, P., Davies, N., Dobson, G. P., Fry, T. C., Kyrieleis, A., e Smith, P. N. MONK and MCBEND: Current status and recent developments, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 82, p. 63–73, 2015.

Reuss, P. **Neutron Physics**. EDP Sciences, France, 2008.

Romano, P. K., Horelik, N. E., Herman, B. R., Nelson, A. G., Forget, B., e Smith, K. OpenMC: A state-of-the-art Monte Carlo code for research and development, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 82, p. 90–97, 2015.

Shultis, J. K. e Faw, R. E. **Fundamentals of Nuclear Science and Engineering**. Marcel Dekker, New York, 2002.

Sjenitzer, B. L. **The Dynamic Monte Carlo Method for Transient Analysis of Nuclear Reactors**. Tese de doutorado, Technische Universiteit Delft, 2013.

Tumelero, F., Bodmann, B. E. J., de Vilhena, M. T., e Lapa, M. F. On the solution of the neutron diffusion kinetic equation in planar geometry free of stiffness with convergence analysis, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 125, p. 272–282, 2019.

APÊNDICE A – Erro Relativo das Parametrizações

O erro relativo de cada parametrização das seções de choque utilizadas no presente estudo em função da energia é ilustrado nas figuras abaixo, sendo que este é obtido por meio da Equação 5.7.

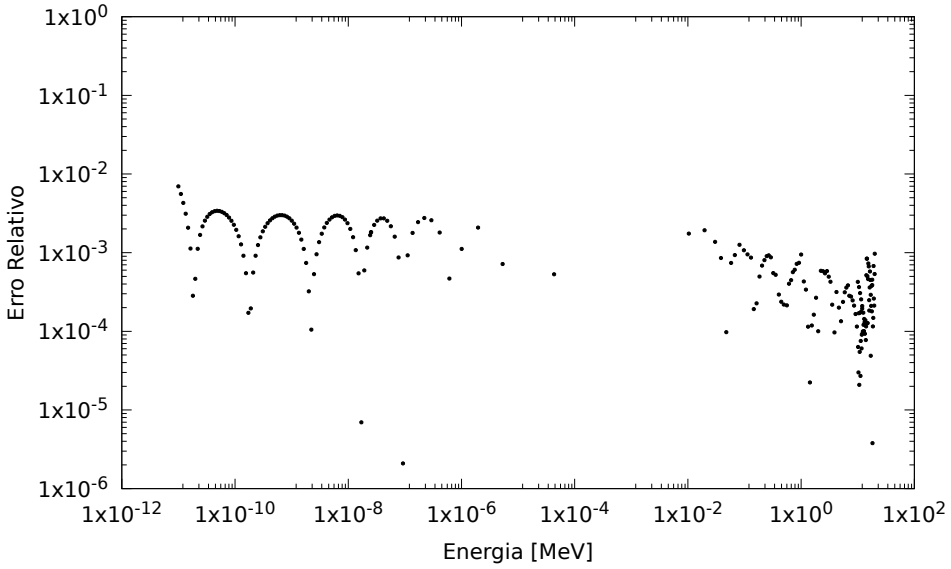


Figura A.1 – Erro relativo espalhamento elástico ^{1}H.

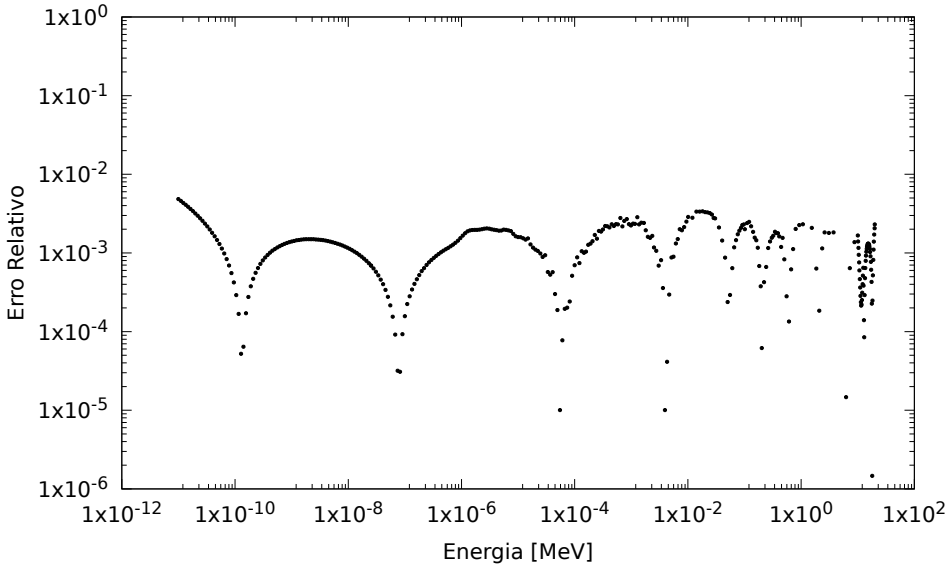


Figura A.2 – Erro relativo captura radiativa ^{1}H.

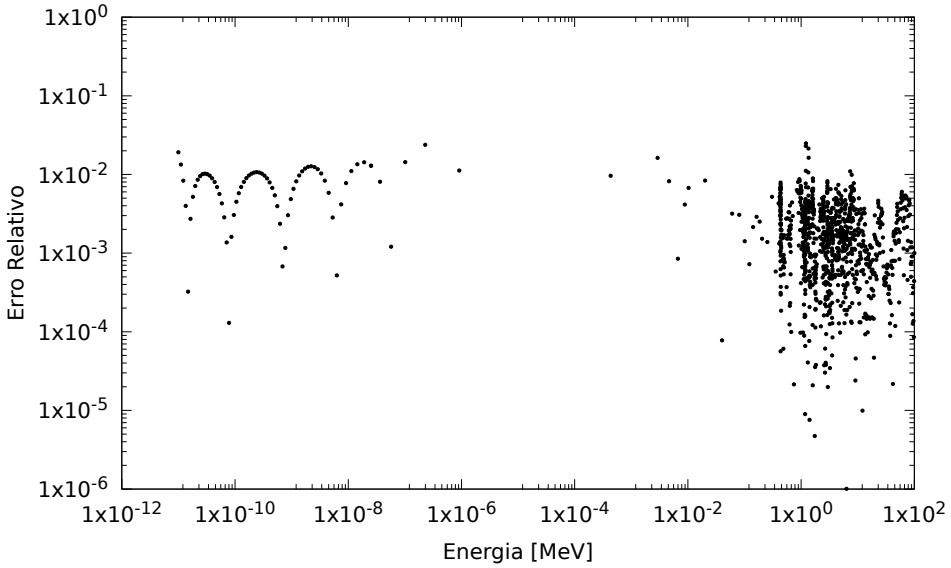


Figura A.3 – Erro relativo espalhamento elástico ^{16}O.

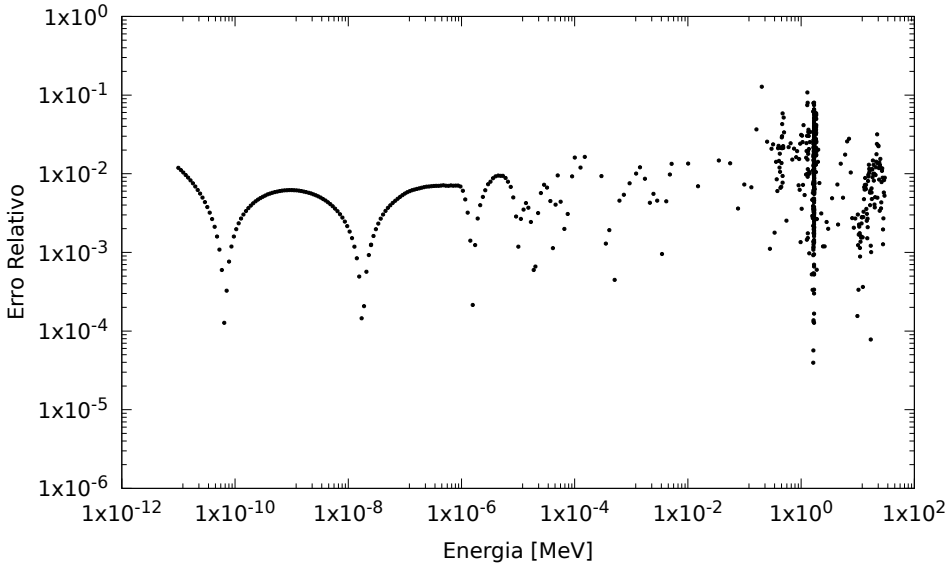


Figura A.4 – Erro relativo captura radiativa ^{16}O.

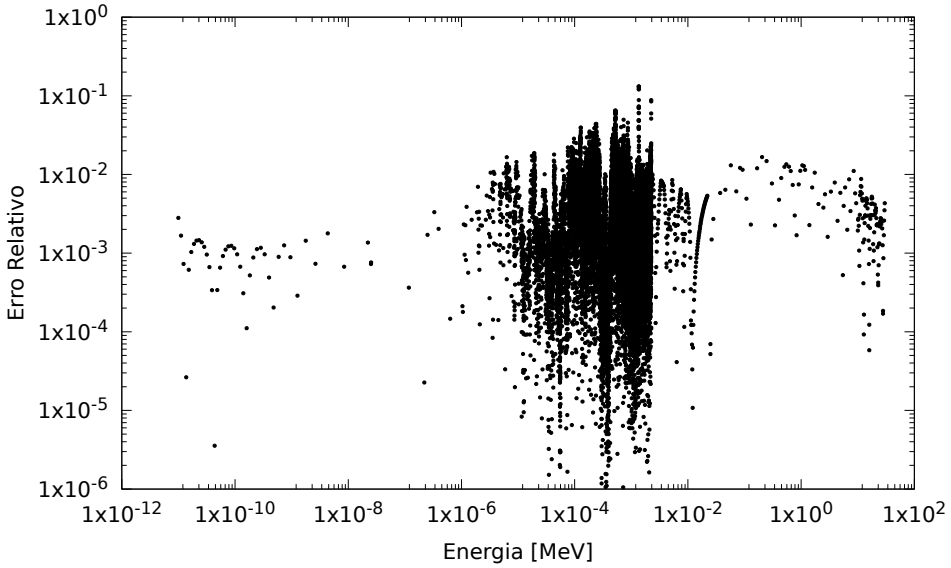


Figura A.5 – Erro relativo espalhamento elástico ^{235}U.

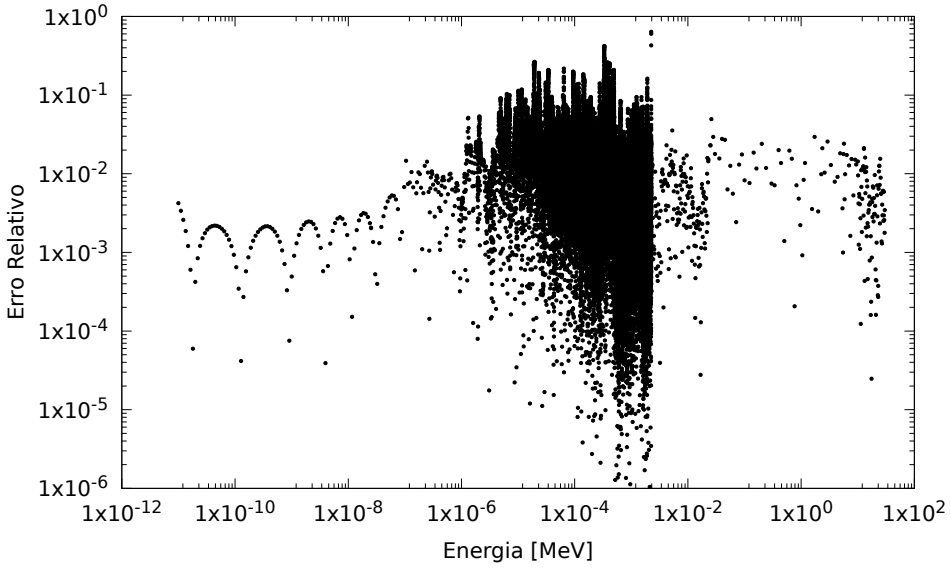


Figura A.6 – Erro relativo captura radiativa ^{235}U.

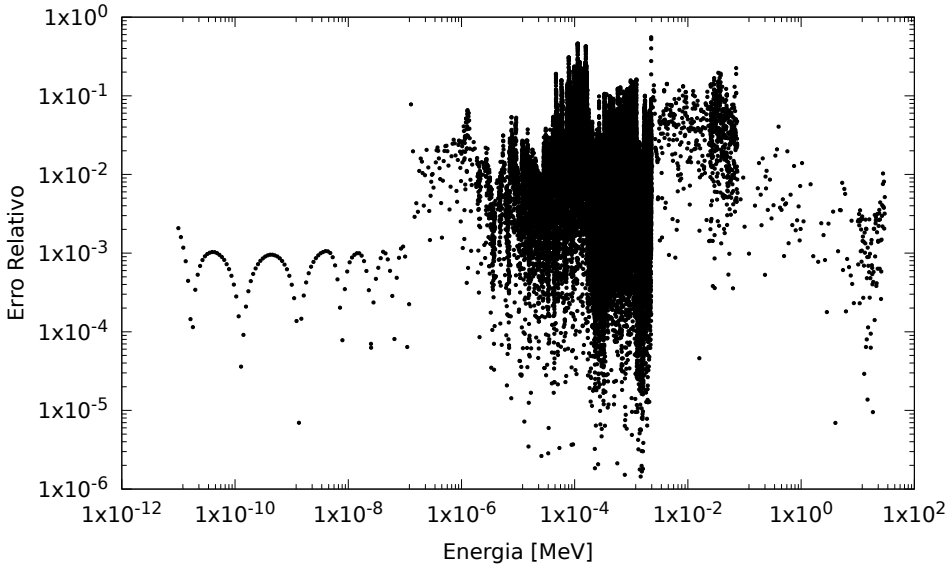


Figura A.7 – Erro relativo fissão ^{235}U.

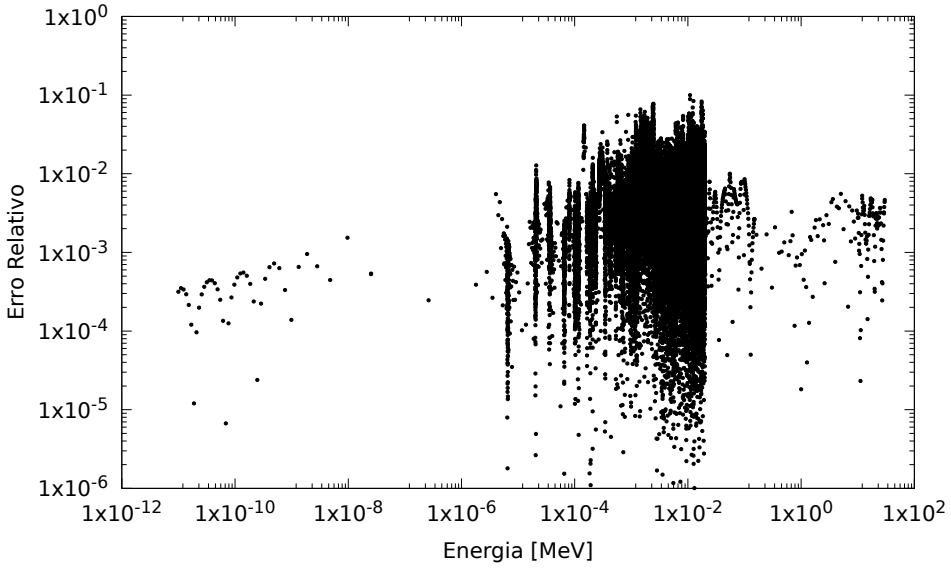


Figura A.8 – Erro relativo espalhamento elástico ^{238}U.

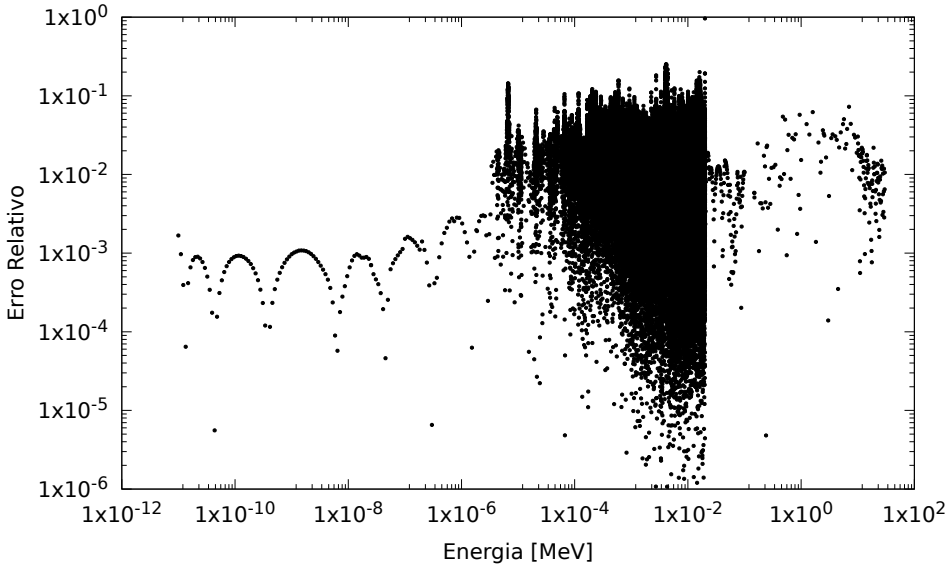


Figura A.9 – Erro relativo captura radiativa ^{238}U.

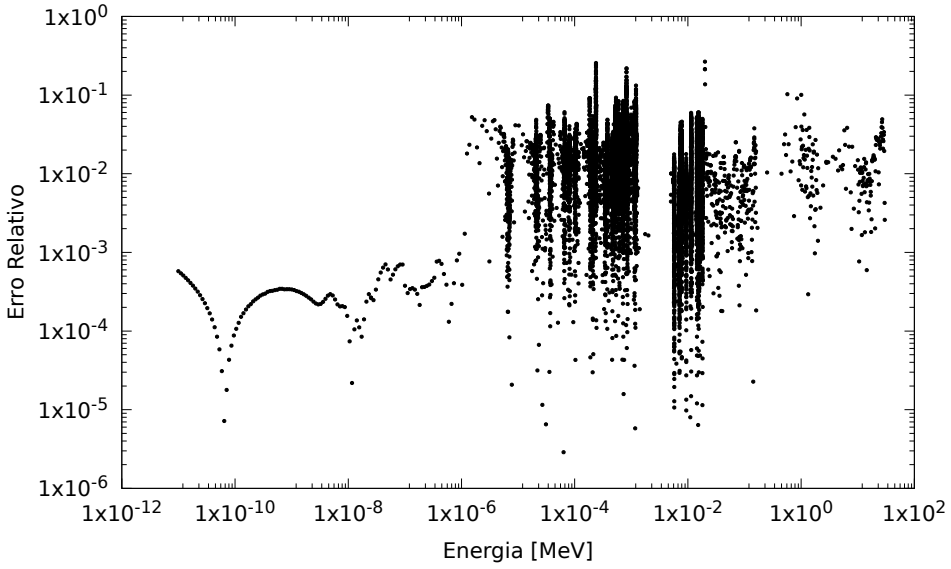


Figura A.10 – Erro relativo fissão ^{238}U.