

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ PRO-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA

TARCILA OLIVEIRA MATOS MUNIZ

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA BLINDAGEM DE NÊUTRONS UTILIZANDO MÉTODOS DETERMINÍSTICOS

Ilhéus-BA 2017

TARCILA OLIVEIRA MATOS MUNIZ

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA BLINDAGEM DE NÊUTRONS UTILIZANDO MÉTODOS DETERMINÍSTICOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Estadual de Santa Cruz, como parte das exigências para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Francisco Bruno Souza Oliveira

Ilhéus-BA 2017

,
 77f. : il. Orientador : Francisco Bruno Souza Oliveira. Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual de Santa Cruz. Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacio- nal em Ciência e Tecnologia. Inclui referências.
 Física nuclear – Nêutron – Métodos de simulação. 2. Si- mulação (computadores). 3. Modelos matemáticos. I. Oliveira, Francisco Bruno Souza. CDD – 539.7213

TARCILA OLIVEIRA MATOS MUNIZ

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DA BLINDAGEM DE NÊUTRONS UTILIZANDO MÉTODOS DETERMINÍSTICOS

Ilhéus-BA, 10/02/2017

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Francisco Bruno Souza Oliveira UESC (Orientador)

Dominguez S. Dawy

Prof. Dr. Dany Sanchez Dominguez UESC

Jesus Alberdo Rosalis Gavie

Prof. Dr. Jesús Alberto Rosales García UFPE

Dedico: a Deus, a minha mãe, familiares e aos meus amigos.

Agradecimentos

- A Deus, eu agradeço pela concessão da vida, saúde, força, esperança, perseverança, por ter caminhado ao meu lado desde a minha existência e por ter permitido a realização dessa pesquisa;
- A toda minha família, eu agradeço pelo afeto e atenção depositadas;
- Agradeço a minha mãe, heroína que me deu apoio e incentivo nas horas difíceis, me auxiliando sempre a conquistar meus sonhos;
- Agradeço aos meus amigos Thirza, Isaac, Lorena, Valéria e Leandro por todos os momentos de alegria, pela compreensão e incentivo;
- À Universidade Estadual de Santa Cruz, eu agradeço pela oportunidade da realização do curso;
- À CAPES, eu agradeço pelo auxilio financeiro concedido;
- Aos funcionários da UESC e do PPGMC, eu agradeço pelo suporte; agradeço especialmente a Ellen Pitombo pelos momentos de resenha, companheirismo e por ter se tornado uma grande amiga;
- Meus agradecimentos aos amigos da turma 2014.2, Rodrigo, Rogério, Gabriel Mello, companheiros de trabalhos e irmãos na amizade que fizeram parte da minha formação e que vão continuar presentes em minha vida. Agradeço também a Guilherme, Ciro, Carlos, Gabriel Ganem, colegas da turma 2015 por sempre terem acreditado na conclusão desse sonho;
- Aos professores do PPGMC, eu agradeço pelas informações partilhadas; agradeço especialmente, ao professor doutor Dany Sanchez Dominguez que contribuiu significativamente para a minha aprendizagem na área de engenharia nuclear, além de ter se tornado um exemplo de professor sempre dedicado e disposto a ajudar;
- Ao meu orientador, professor doutor Francisco Bruno Souza Oliveira, eu agradeço pelo companheirismo, confiança, perseverança, por ter escolhido participar comigo dessa importante etapa da minha vida. Obrigada também pela amizade e principalmente pela oportunidade;
- Aos professores do DCET-UESC, especialmente Eduardo Bernardes, Marcos Ferreira, Marcos Rogério, Natália Rocha e Pryscilla Silva, eu agradeço pela confiança, amizade e pelo apoio, estando sempre presentes e dispostos a ajudar, não só nessa pesquisa como em toda minha formação acadêmica;
- A todos que direta ou indiretamente fizeram parte de minha formação, o meu muito obrigada.

"Deus é a minha fortaleza e a minha força e ele perfeitamente desembaraça o meu caminho." II Samuel 22.33. Bíblia Sagrada. Simulação computacional da blindagem de nêutrons utilizando métodos determinísticos

Resumo

Nessa pesquisa nos atentamos para problemas denominados problemas de fonte fixa, onde temos uma fonte de nêutrons e um domínio com meio não multiplicativo. Particularmente, simularemos a blindagem da fonte de nêutrons utilizando métodos numéricos determinísticos para encontrar soluções para os fluxos escalar e angular de nêutrons em um domínio unidimensional. Para modelarmos esses problemas faz-se necessário o estudo da física envolvida e para a modelagem matemática utilizamos a equação de transporte de Boltzmann para partículas neutras. Para resolver a equação de Boltzman faremos aproximações e utilizaremos os métodos numéricos consolidados e disponibilizados na literatura que possam produzir soluções para esses problemas. Utilizaremos os métodos numéricos Diamond Difference (DD), Step (ou Degrau) e Step Characteristic (Degrau Característico) e escolheremos o que melhor se adequa as simulações a serem realizadas. Para isso, variaremos a ordem da quadratura de Gauss-Legendre, bem com a espessura da malha a ser utilizada. Analisaremos os materiais a serem utilizados na composição das blindagens propostas e os categorizaremos em função das suas características referentes a sua iteração com nêutrons. Serão simulados e analisados problemas modelo que possam identificar blindagens eficientes para os parâmetros pré-definidos para o fluxo emergente.

Palavras-chave: Equação de Transporte de Nêutrons; Ordenadas Discretas; Problemas de Blindagem; Modelagem Computacional.

Computational simulation of neutron shielding using deterministic methods

Abstract

In this research we consider problems called fixed source problems, where we have a source of neutrons and a domain with non-multiplicative medium. In particular, we will simulate the shielding of the neutron source using deterministic numerical methods to find solutions for the scalar and angular fluxes of neutrons in a one-dimensional domain. To model these problems it is necessary to study the theorical physics involved and for mathematical modelling we use the Boltzmann equation of transport for neutral particles. To solve the Boltzmman equation we will make approximations and use the numerical methods consolidated and available in the literature that can produce solutions to these problems. We will use the numerical methods: Diamond Difference (DD), Step and Step Characteristic and we will choose what best suits the simulations to be performed. For this, we will vary the order of Gauss-Legendre quadrature, as well as the thickness of the mesh to be used. We will analyze the materials to be used in the composition of the proposed shielding and categorize them according to their characteristics regarding their iteration with neutrons. Case problems will be simulated and analyzed that can identify efficient shielding for the predefined parameters for the emergent flow.

Keywords: Neutron Transport Equation; Discrete Ordinates; Shielding Problems; Computational Modeling.

Lista de figuras

Figura 1 – Domínio espacial V num problema de transpo	rte de nêutrons contor-	
nado pela superfície \varGamma e \vec{n} representa o vetor	normal	8
Figura 2 – Representação de condições de contorno do ti	ipo Albedo	9
Figura 3 – Representação de condições de contorno do ti	ipo Periódica	10
Figura 4 – Espaço de fase em geometria cartesiana unidi	mensional	13
Figura 5 – Representação da simetria das ordenadas di	scretas em problemas	
unidimensionais		17
Figura 6 – Grade espacial para o domínio unidimensiona	al D de comprimento L	18
Figura 7 – Fluxograma dos métodos numéricos estudado	OS	26
Figura 8 – Um feixe incidente de nêutrons monoenergé	ticos em direção a um	
alvo fino		27
Figura 9 – Hierarquia da seção de choque de nêutrons .		29
Figura 10 – Problema de validação		45
Figura 11 – Problema modelo A		47
Figura 12 – Problema modelo C		60
Figura 13 – Distribuição do fluxo angular - Materiais: Van	nádio-Níquel-Manganês	64
Figura 14 – Problema modelo D		65
Figura 15 – Distribuição do fluxo angular - Materiais: Var	nádio - Níquel- Manga-	
$n \hat{e} s 9 cm \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots$		68
Figura 16 – Problema modelo E		69
Figura 17 – Distribuição do fluxo angular de nêutrons - N	/lateriais: Níquel-Boro-	
Vanádio		72

Lista de tabelas

Tabela 1 –	Quadratura de Gauss - Legendre S_2, S_4 e S_8	18
Tabela 2 –	Classificação dos materiais	32
Tabela 3 –	Livre Caminho Médio do nêutron para os materiais listados nessa	
	seção	35
Tabela 4 –	Propriedades físico do material	46
Tabela 5 –	Classificação das células espaciais da grade espacial para o problema	
	de validação	46
Tabela 6 –	Comparação entre os fluxos escalares de nêutrons utilizando a qua-	
	dratura de Gauss-Legendre de ordem 128	46
Tabela 7 –	Classificação das células espaciais - material: Ferro	48
Tabela 8 –	Classificação das células espaciais - material: Manganês	48
Tabela 9 –	Classificação das células espaciais - material: Vanádio	48
Tabela 10 –	Parâmetros materiais - Ferro	48
Tabela 11 –	Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percen-	
	tual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond	
	$\label{eq:difference-Quadratura} Difference - Quadratura S_2 \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots $	49
Tabela 12 –	Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percen-	
	tual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond	
	Difference - Quadratura S_4	50
Tabela 13 –	Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percen-	
	tual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond	
	$Difference - Quadratura S_8 \dots \dots$	51
Tabela 14 –	Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percen-	
	tual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond	
	Difference - Quadratura S_{16}	52
Tabela 15 –	Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percen-	
	tual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond	
	Difference - Quadratura S_{32}	53
Tabela 16 –	Distribuição do fluxo escalar neutrônico e os desvios relativos percen-	
	tuais das diferentes quadraturas para o material Ferro	54
Tabela 17 –	Parâmetros materiais	54
Tabela 18 –	Distribuição do fluxo escalar neutrônico e os desvios relativos percen-	
	tuais das diferentes quadraturas para os materiais Vanádio e Manganês	55
Tabela 19 –	Distribuição do fluxo neutrônico, desvio relativo percentual e nú-	
	mero de iterações obtidos utilizando o Método Diamond Difference -	
	Quadratura S_{16}	57

Tabela 20 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, desvio relativo percentual e	
número de iterações obtidos utilizando o Método Step - Quadratura S $_{16}$	58
Tabela 21 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, desvio relativo percentual e	
número de iterações obtidos utilizando o Método Step Characteristic	
- Quadratura S_{16}	59
Tabela 22 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro,	
Manganês e Vanádio - 21 cm	62
Tabela 23 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Man-	
ganês, Níquel e Vanádio	62
Tabela 24 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro,	
Manganês e Platina - 21 cm	63
Tabela 25 – Distribuição do fluxo angular de nêutrons para $x = 21 \text{ cm} \dots \dots \dots$	64
Tabela 26 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro,	
Manganês e Vanádio - 9 cm	66
Tabela 27 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Man-	
ganês, Níquel e Vanádio - 9 cm	66
Tabela 28 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro,	
Manganês e Platina - 9 cm	67
Tabela 29 – Distribuição do fluxo angular de nêutrons para $x = 9 \text{ cm} \dots \dots \dots$	68
Tabela 30 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico para o problema E utilizando	
os materiais Ferro, Boro e Vanádio	70
Tabela 31 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico para o problema modelo E	
utilizando os materiais Níquel, Boro e Vanádio	70
Tabela 32 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico para o problema modelo E	
utilizando os materiais Ferro, Boro e Platina	71
Tabela 33 – Distribuição do fluxo angular neutrônico para x = 9cm utilizando os	
materiais Níquel, Boro e Vanádio	71

Sumário

1 – Intr	odução	1										
1.1	Objetivos	4										
	1.1.1 Objetivo geral											
	1.1.2 Objetivos específicos	4										
1.2	Estrutura da pesquisa	4										
2 – For	mulação matemática e computacional	6										
2.1	Equação de transporte de nêutrons	6										
2.2	Métodos numéricos	15										
	2.2.1 Método das Ordenadas Discretas	16										
	2.2.2 Métodos de diferenças finitas	20										
	2.2.3 Solução numérica usando o esquema iterativo SI (Source iteration)	20										
3 – Seç		27										
3.1		27										
3.2	Seção de choque macroscópica e livre caminho médio	30										
3.3	Materials	31										
4 – Apl	icações - problemas de fonte fixa	36										
4.1	Petróleo	36										
4.2	Blindagem	38										
4.3	Uso dos nêutrons em procedimentos terápicos	41										
5 – Res	ultados e Discussão	44										
5.1	Validação	45										
5.2	Análise das quadraturas de <i>Gauss-Legendre</i>	47										
	5.2.1 Problema modelo A	47										
5.3	Análise dos métodos Diamond Difference, Step e Step Characteristic	55										
	5.3.1 Problema modelo B	55										
5.4	Problema modelo C	60										
5.5	Problema modelo D	65										
5.6	Problema modelo E	69										
6 – Cor	6 – Conclusões e Trabalhos Futuros 73											

Referências	•	•	• •	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	•	7	74	
-------------	---	---	-----	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	----	--

1 Introdução

Os nêutrons foram identificados pela primeira vez em 1932, pelo físico inglês James Chadwick (1891-1974). Esse cientista realizava experimentos com radioatividade quando detectou a existência de uma partícula que não possuía carga elétrica e a essa partícula, ele batizou de nêutron. Os nêutrons se fazem presente no núcleo do átomo, em conjunto com os prótons (partículas de carga positiva), possuindo os nêutrons, valores de massa próximo aos valores de massa dos prótons. A descoberta dos nêutrons tornou-se muito importante para a ciência porque devido a neutralidade elétrica, o nêutron consegue mesmo possuindo baixa energia, entrar no interior de um átomo e penetrar no núcleo desse átomo, sem atingir os elétrons orbitais (OKUNO, 1998). É importante destacar, que após essa descoberta, vários experimentos foram feitos com o objetivo de investigar o resultado de interações nêutron - núcleo.

Existem diversas aplicações dos nêutrons na ciência e tecnologia, como a produção de radioisótopos, radioterapia, prospecção de petróleo e gás natural, além da produção da energia elétrica, a partir de usinas nucleares. Foi após investigações experimentais de interações dos nêutrons com a matéria, que tornou-se possível produzir reatores nucleares que geram energia elétrica, tendo como base, uma cadeia de reações nucleares de fissão dos núcleos dos átomos pesados, por exemplo, átomos de urânio, com grande liberação de energia.

Percebemos então, que existem muitas aplicações benéficas para a sociedade. Dessa forma, se faz necessário estudos teóricos sobre o transporte de nêutrons, uma vez que, depois de abandonar a fonte, os nêutrons começam a experimentar interações com os núcleos dos átomos que constituem o meio irradiado. Esses processos, alteram a energia dos nêutrons e a distribuição tanto no espaço como no tempo, além disso, ocorrem modificações no estado e nas características dos núcleos afetados pelos choques. As principais características dos processos de interação nêutron - núcleo é a formação de núcleos compostos e a diversificação nos mecanismos de decaimentos para estados quânticos de menor energia (KNOLL, 2010). Tais processos, podem ser classificados em duas categorias básicas, sendo elas: absorção e espalhamento.

Nunes (2011) diz que a absorção de nêutrons representa a desexcitação do composto nêutron - núcleo pela emissão de partículas que não sejam nêutrons ou através da fragmentação do composto em um processo denominado fissão nuclear. Quando a absorção para desexcitação se dá com emissão de partículas que não sejam nêutrons, ela recebe o nome de captura radiativa, compreendendo processos de interação tipo nêutron-gama (n, γ) ou reações do tipo partícula carregada como nêutron-próton (n, p) ou nêutron-alfa (n, α) . Pode ocorrer também reações nêutron-nucleares do tipo (n, 2n),

(n, 3n),..., em que um nêutron é absorvido com emissão de outros 2, 3, ... nêutrons.

De acordo com Filho (1999), são classificados em espalhamento potencial e espalhamento com formação de núcleo composto, eventos de espalhamento de nêutrons por núcleos atômicos do meio hospedeiro onde os nêutrons migram. Tais eventos podem ser classificados também como espalhamento elástico e espalhamento inelástico. O espalhamento elástico é visto como um processo de interação entre o nêutron e o núcleo resultando em uma variação da energia cinética do nêutron; energia esta que será transferida ao núcleo alvo na forma de energia de movimento, não alterando, no entanto, sua energia interna. Filho (1999) ainda diz que, o espalhamento inelástico, pode ser entendido como um processo de interação entre o núcleo, causando uma variação da energia cinética do nêutron, energia que será transferida ao núcleo alvo na forma de energia que será transferida ao núcleo alvo na energia que será transferida ao núcleo alvo na forma de energia que será transferida ao núcleo alvo na forma de energia que será transferida ao núcleo alvo na forma de energia que será transferida ao núcleo alvo na energia cinética do nêutron, energia que será transferida ao núcleo alvo na forma de energia de movimento e energia de excitação (energia interna do núcleo alvo).

É importante salientar que tanto o espalhamento elástico quanto o espalhamento inelástico produzem o mesmo efeito no final, ou seja, ocorre a redução da energia dos nêutrons. Vendo isso, a probabilidade de ocorrer alguma dessas reações está diretamente relacionado a energia cinética dos nêutrons, bem como, o tipo de nuclídeo que participa do choque, sendo medido fenomenologicamente por quantidades que são definidas como seções de choque nucleares e são determinadas teórica ou experimentalmente (CASTAGNET; BARDAL; SAID, 1975; KNOLL, 2010). Por conta das especifidades dessas interações, normalmente os nêutrons são classificados de acordo com três faixas de energia descritas em (CASTAGNET; BARDAL; SAID, 1975; KNOLL; SAID, 1975), a saber:

- nêutrons térmicos possuem energia menor que 0,5 eV; vale ressaltar que os nêutrons térmicos, em sua maioria é resultado do processo de moderação, em que se baseia em uma série de colisões entre os nêutrons e os núcleos do moderador até que haja um equilíbrio térmico.
- nêutrons epitérmicos possuem energia de 0,5 eV a 10 keV; os nêutrons epitérmicos são nêutrons que ainda estão em processo de moderação, a respeito da distribuição de energia, essa é aproximadamente proporcional ao inverso do valor da energia.
- nêutrons rápidos possuem energia maior que 10 keV; os nêutrons rápidos são provindos de reações nucleares dos elementos combustíveis.

A descrição da migração dos nêutrons no interior de um meio material, com a probabilidade de interação com os núcleos dos átomos constituintes desse meio, constitui a modelagem física do fenômeno de transporte de nêutrons. Uma vez realizada essa modelagem física devemos prosseguir com a modelagem matemática e computacional deste problema físico, pois somente assim, estaremos prontos para realizar simulações com a respeito da distribuição de nêutrons no nosso domínio de interesse. Existem basicamente, duas escolas distintas para realizarmos a modelagem computacional:

- a) escola probabilística tem como objetivo resolver aproximadamente o problema exato, nessa linha estão inclusos os métodos estocásticos, por exemplo, os métodos de Monte Carlo (HAGHIGHAT, 2014).
- b) escola deterministica tem como objetivo resolver exatamente um problema aproximado, nessa linha, estão incluídos os métodos determinísticos, por exemplo, métodos de elementos finitos (ZIENKIEWICZ, 1971), métodos da paridade par e impar (ADAMSL; LARSEN, 2002), os métodos integrais (BELL; GLASSTONE, 1970), método das ordenadas discretas (ADAMSL; LARSEN, 2002), os métodos nodais (BADRUZZAMAN, 1990), entre outros.

É importante destacar que nessa dissertação não faremos uso da modelagem probabilística e sim da modelagem determinística pois utilizaremos a equação de transporte de partículas neutras (nêutrons e fótons), também conhecida como equação linearizada de Boltzmann, devido sua similaridade com a expressão obtida por Ludwig Boltzmann em conexão com a teoria cinética dos gases (BOLTZMANN, 1872).

A equação de transporte de nêutrons é uma equação integro-diferencial parcial linear de primeira ordem em sete variáveis independentes: três espaciais (x, y, z), duas angulares (μ, η) , uma energética (E) e uma temporal (t). Devido a alta complexidade, sendo em muitas vezes, impossível obtermos uma solução analítica em forma fechada para a solução de problemas associados ao transporte de partículas neutras (CASE; ZWEIFEL, 1967), métodos numéricos são desenvolvidos visando obtermos soluções aproximadas para o problema. Com o intuito de gerarmos métodos de soluções numéricas eficientes, formulações simplificadas da equação de transporte de nêutrons precisam ser utilizadas. Estas formulações discretizam as variáveis independentes, fazendo com que, a equação integro-diferencial se torne um sistema de equações lineares e algébricas e posteriormente utilizamos diferentes técnicas de varredura para resolver os sistemas de equações encontrados. A dependência energética (E) é tratada utilizando a aproximação multigrupo (LEWIS; MILLER, 1984). Para discretizarmos as variáveis angulares (μ, η) , podemos usar diferentes abordagens, sendo elas: a aproximação de difusão (BELL; GLASSTONE, 1970), a formulação em ordenadas discretas (CARLSON; LATHROP, 1968) e a expansão em harmônicos esféricos. As variáveis espaciais (x, y, z), podem ser discretizadas utilizando métodos de malha fina, como o método Diamond Difference (DD) descrito em (LEWIS; MILLER, 1984), métodos de malha média, como os métodos de elementos finitos e métodos de malha grossa como os métodos nodais (LAWRENCE, 1986). Por fim, a variável temporal (t) pode ser discretizada por métodos de malha fina, média e grossa.

Nessa dissertação, como já dissemos anteriormente, utilizaremos o modelo determinístico do transporte de partículas neutras em meios não multiplicativos, ou seja, meios materiais onde não ocorre multiplicação de partículas. Noutras palavras, quando uma partícula colide com um núcleo atômico constituinte do meio material, pode ocorrer duas coisas, ou ela é absorvida (ou seja, não gera partículas idênticas) ou ela sofre espalhamento (ou seja, após uma colisão, um nêutron irá emergir e pode não ser o mesmo nêutron que colidiu com o núcleo-alvo). Ademais, consideramos (i) estado estacionário, ou seja, não existe dependência temporal; (ii) problema de transporte de nêutrons monoenergéticos, ou seja, não ocorre transferência de energia nas colisões dos nêutrons com os núcleos (iii) fonte fixa, isto é, nêutrons são gerados por fontes externas em todas as direções com a mesma energia e intensidade e, por fim (iv) geometria unidimensional.

Uma vez observada as considerações acima, na próxima seção apresentaremos os objetivos dessa dissertação e em seguida faremos uma sinopse do que será abordado em cada capitulo.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo geral

- Analisar o fluxo de nêutrons na extremidade de blindagens homogêneas e heterogêneas utilizando métodos determinísticos para o transporte.

1.1.2 Objetivos específicos

- Identificar os materiais a serem utilizados na blindagem.

- Analisar a influência do grau da quadratura angular na modelagem proposta.
- Analisar a influência dos métodos numéricos na modelagem proposta.
- Identificar arranjos mais eficientes na blindagem.

1.2 Estrutura da pesquisa

A dissertação está organizada da seguinte maneira: (i) Introdução; (ii) Formulação Matemática e Computacional; (iii) Seção de Choque; (iv) Aplicações; (v) Resultados e Discussões e por fim (vi) Conclusões e Trabalhos futuros.

No capitulo 2 é descrita a formulação matemática computacional e os métodos numéricos necessários para o desenvolvimento dessa pesquisa.

O capitulo 3 aborda conceitos a respeito de seção de choque e livre caminho médio do nêutron. Além disso, também é apresentado os materiais físicos escolhidos para compor os problemas modelos estudados no capitulo 5.

Existem diversas aplicações do nêutrons na ciência e tecnologia como já citamos anteriormente. Assim, o capitulo 4 destaca aplicações relacionadas ao petróleo e a blindagem pois existe diversos trabalhos com essas aplicações e a presente pesquisa estuda problemas relacionados a blindagem.

O capitulo 5 mostra o resultado das simulações realizadas com os métodos numéricos estudados e discussões a respeito dos resultados obtidos.

Por fim, o capitulo 6 apresenta as conclusões da pesquisa além de apresentar os trabalhos futuros que poderão ser desenvolvidos.

2 Formulação matemática e computacional

Neste capitulo, apresentamos a equação de transporte de nêutrons, na formulação de ordenadas discretas, a uma velocidade, em geometria cartesiana unidimensional, com espalhamento isotrópico. Essa equação retrata o fenômeno de transporte de partículas neutras (a saber, fótons e nêutrons), que interagem diretamente com os núcleos dos átomos mas não entre si. É importante destacar que, para realizarmos a modelagem matemática é necessário considerarmos que todos os parâmetros materiais do meio hospedeiro sejam conhecidos além de considerarmos também, a migração média das partículas neutras e não o comportamento individual de cada uma. Dando sequência ao capitulo, na próxima seção apresentamos alguns conceitos básicos a respeito de Métodos Numéricos e em seguida, na seção seguinte, detalhamos o Método de Ordenadas Discretas.

2.1 Equação de transporte de nêutrons

Com o intuito de realizarmos a modelagem computacional utilizando a escola determinística, faz-se necessário uso da equação de transporte de nêutrons mas para tal, devemos considerar verdadeiras o conjunto de hipóteses físicas abaixo escritas em (LEWIS; MILLER, 1984):

- a) As partículas são consideradas corpos pontuais isto significa que o comportamento ondulatório da partícula é desprezado, isto é, somente partículas com longitude de ondas menores que o decaimento atômico são consideradas. Nêutrons percorrem em média muitas distâncias interatômicas entre colisões, por tal motivo, partículas com longitude de onda pequena podem ser descritas apropriadamente em função de sua localização e velocidade. Partículas de energia muito baixa são excluídas da análise. Por esse motivo a energia de vibração dos átomos e moléculas do material pode ser desconsiderada.
- b) Os nêutrons viajam em linha reta entre os pontos de colisão o movimento do nêutron não sofre interferência das forças gravitacionais nem de campos elétricos e magnéticos, porque a força gravitacional é muito fraca e o nêutron não possui carga elétrica. Como os campos nucleares são fenomenologicamente incorporados nos termos de espalhamento e absorção, podemos considerar que o nêutron viaja em linha reta e com velocidade constante entre colisões.
- c) Interações nêutron-nêutron (partícula-partícula) são desprezadas esta é uma aproximação fisicamente justificável visto que a densidade de nêutrons é muito pequena se comparada com a densidade dos núcleos-alvo em sistemas

reais. A negligência das interações nêutron-nêutron é a razão pela qual a equação de Boltzmann aplicada a nêutrons é linear.

- d) Colisões são consideradas instantâneas o tempo de colisão dos nêutrons com os núcleos é considerado nulo. Esta aproximação consistente é consistente , pois os núcleos compostos que se formam nas iterações nêutron-núcleo vivem menos que 10¹⁴ segundos (LAMARSH; BARATTA, 2001). Para as aplicações práticas as partículas emergentes são emitidas imediatamente no próprio ponto de colisão.
- e) As propriedades nucleares e a composição material do meio são conhecidas e independentes do tempo – os efeitos de alargamento Doppler provocados pelas vibrações do meio material e outros efeitos que afetem as seções microscópicas de interação são desconsiderados. As mudanças na composição isotópica do combustível provocadas pelas interações nêutron-núcleo, também são desprezadas.
- f) Apenas o valor esperado ou valor médio da distribuição da densidade de nêutrons é considerado – os elementos do espaço de fase (espaço – energia – ângulo) são considerados superficialmente grandes, de tal forma que as flutuações estatísticas no interior destes elementos são desprezíveis. As flutuações estatísticas não podem ser tratadas pela equação de Boltzmann.

Considerando as hipóteses anteriores, utilizamos nessa dissertação, a equação de transporte de nêutrons para meios não multiplicativos e problemas independentes do tempo. Assim, escrevemos a equação da seguinte maneira

$$\hat{\Omega} \cdot \overrightarrow{\nabla} \Psi(\overrightarrow{r}, E, \hat{\Omega}) + \sigma_t(\overrightarrow{r}, E) \Psi(\overrightarrow{r}, E, \hat{\Omega}) =$$

$$\int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' [\sigma_s(\vec{r}, E' \to E, \hat{\Omega}' \to \hat{\Omega}) \times \Psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}')] + S(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$$
(1)

Os termos que aparecem no lado esquerdo da equação estão relacionados com os fenômenos de perdas de nêutrons e, no lado direito, os termos de fonte associados aos fenômenos de produção de nêutrons.

A grandeza $\Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ é definida como fluxo angular de nêutrons e pode ser fisicamente interpretado como o número esperado de nêutrons na posição \vec{r} com energia E com direção do movimento $\hat{\Omega}$; $\sigma_t(\vec{r}, E)^1$ é a seção de choque macroscópica total de interação no ponto \vec{r} para nêutrons com energia E; $\sigma_s(\vec{r}, E' \to E, \hat{\Omega}' \to \hat{\Omega})$ é a seção de choque diferencial de espalhamento no ponto \vec{r} para nêutrons secundários

¹Normalmente o símbolo utilizado na literatura para representar a seção de choque macroscópica total é a letra grega \sum (sigma maiúscula) porém nessa dissertação foi substituído por σ , com o intuito de evitar ambiguidade nas equações.

com energia E e direção de movimento $\hat{\Omega}$ que são produzidos por espalhamento a partir de nêutrons de energia E', deslocando-se na direção $\hat{\Omega}'$. Por fim, o termo $S(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ representa a fonte externa de nêutrons na posição \vec{r} com energia E e direção do movimento $\hat{\Omega}$; a integração utilizada é a de Riemann.

Visando solucionar a equação (1) e encontrarmos o fluxo angular $\Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ é necessário especificarmos as seções de choque σ_t e σ_s , a distribuição de fontes externas $S(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ e conhecer as condições de contorno. O fluxo incidente na fronteira do domínio é especificado através das condições de contorno. As condições de contorno admitem duas classificações, sendo elas: implícitas ou explicitas. A condição de contorno é dita explicita ou prescrita quando o fluxo angular é explicitamente conhecido. Um exemplo de condição prescrita que aparece em diversos problemas é a condição tipo superfície livre também chamada de condição tipo vácuo, em que o fluxo incidente na fronteira é nulo. Tendo como base a Figura 1 que mostra um domínio de cálculo arbitrário, escrevemos a condição de contorno do tipo vácuo da seguinte forma:

$$\Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = 0, \quad \hat{\Omega} \bullet \hat{n} < 0, \quad \vec{r} \epsilon \Gamma.$$
⁽²⁾



Figura 1 – Domínio espacial V num problema de transporte de nêutrons contornado pela superfície Γ e \vec{n} representa o vetor normal.

Fonte: Lewis e Miller (1984)

Uma condição de contorno é dita implícita quando o fluxo incidente é descrito em função de outras grandezas do problema, como por exemplo, em função do fluxo emergente. Esse tipo de condição de contorno é frequentemente usada em cálculo de transportes para considerar condições de simetria impostas pelo problema físico ou propriedades de reflexão de uma interface. Um exemplo de condição de contorno implícita é a condição de contorno do tipo Albedo. Essa condição de contorno estabelece que o fluxo incidente é proporcional ao fluxo emergente na direção correspondente a reflexão especular e aparece na seguinte forma:

$$\Psi(\overrightarrow{r}, E, \hat{\Omega}) = \alpha(E)\Psi(\overrightarrow{r}, E, \hat{\Omega}') \quad \hat{\Omega} \bullet \hat{n} < 0, \quad \overrightarrow{r} \epsilon \Gamma.$$
(3)

onde $\alpha(E)$ é a constante de proporcionalidade de Albedo, $\hat{\Omega}$ é a direção de reflexão correspondente à direção emergente $\hat{\Omega}'$ conforme ilustramos na Figura 2, onde é importante destacar que a condição de contorno do tipo Albedo que está sendo utilizada é governada pela seguinte igualdade: $\hat{\Omega} \bullet \hat{n} = -\hat{n} \bullet \hat{\Omega}'$.



Figura 2 – Representação de condições de contorno do tipo Albedo.

Fonte: Lewis e Miller (1984)

Um caso particular da condição de contorno tipo Albedo ocorre quando $\alpha(E) = 1$, neste caso temos

$$\Psi(\overrightarrow{r}, E, \hat{\Omega}) = \Psi(\overrightarrow{r}, E, \hat{\Omega}') \tag{4}$$

esta condição de contorno é chamada condição de contorno reflexiva. Neste caso, todos os nêutrons emergentes através da superfície Γ são refletidos de volta ao interior do volume V.

Outro tipo de condição de contorno é a condição de contorno periódica. Nesse caso, a distribuição de fluxo em um contorno é igual a distribuição de fluxo em outro contorno em um reticulado periódico conforme ilustrado na Figura 3 e expressamos a condição de contorno periódica na forma

$$\Psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \Psi(\vec{r} + \vec{r_g}, E, \hat{\Omega})$$
(5)



Figura 3 – Representação de condições de contorno do tipo Periódica Fonte: Lewis e Miller (1984)

O problema representado pela equação (1) é bastante complexo pois ela se apresenta como uma equação integro-diferencial e um espaço de fase formado por 6 variáveis independentes: 3 espaciais, 2 angulares e 1 energética. Segundo (OSBORN; YIP, 1966) a solução analítica pode ser encontrada somente para problemas simplificados e para geometria bastante simples. Do ponto de vista computacional, quando é possível encontrarmos a solução numérica, a obtenção dessa solução possui um alto custo. Dessa forma, na solução de problemas de transporte de nêutrons é necessário utilizarmos formulações simplificadas. Frequentemente, a obtenção dessas formulações é dada pela discretização das variáveis independentes.

Uma formulação muito utilizada é a multigrupo. Essa formulação tem como objetivo discretizar a variável energética E, cujo intervalo total de energia é dividido em G grupos ou subintervalos de energia contínuos (E_g, E_{g-1}) , g=1, 2, ..., G tal que $E_g < E_{g-1}$. Então, obtemos a equação de transporte para os nêutrons do grupo g integrando a equação (1) no intervalo de energia correspondente

 $\hat{\Omega} \cdot \overrightarrow{\nabla} \Psi_q(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}) + \sigma_{t,q}(\overrightarrow{r}) \Psi_q(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}) =$

$$\sum_{g'=1}^{G} \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \sigma_{s,g',g}(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}' \to \hat{\Omega}) \Psi_{g'}(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}') + S_g(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}), \quad g = 1:G$$
(6)

Nessa dissertação utilizaremos à aproximação a apenas um grupo de energia, chamada de aproximação monoenergética ou de uma velocidade. Sendo assim, omitire-

mos o subscrito g da equação (6). Podemos então escrever a equação monoenergética de transporte, da seguinte maneira

$$\hat{\Omega} \cdot \overrightarrow{\nabla} \Psi(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}) + \sigma_t(\overrightarrow{r}) \Psi(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \sigma_s(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}' \to \hat{\Omega}) \Psi(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}') + S(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}).$$
(7)

Destacamos que na equação (7) reduzimos o espaço de fase a 5 variáveis independentes e a integral em energia no termo de fonte de espalhamento desaparece.

Dando continuidade a simplificação da equação (7), devemos analisar o termo de fonte $S(\vec{r}, \hat{\Omega})$. Sabemos que as fontes no volume de interesse, podem ser externas ou fontes de fissão: fontes externas podem aparecer em meios não multiplicativos, como por exemplo, em cálculos de blindagem e são conhecidos como problemas de fonte fixa ou de penetração profunda; já a fonte de fissão, que aparece em problemas em meios multiplicativos estão relacionados a cálculos de criticalidade de reatores e são chamados de problemas de autovalor. Nessa dissertação, como já havíamos mencionado desde a introdução, nos atentaremos apenas para problemas de fonte fixa. Dessa forma, o termo de fonte da equação (7) pode ser simplificado da seguinte maneira

$$S(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}) = S_{ex}(\overrightarrow{r},\hat{\Omega})$$
(8)

em que $S_{ex}(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega})$ representa a fonte externa.

Simplificando agora o termo de fonte de espalhamento da equação (7), introduzimos uma aproximação para a seção diferencial de espalhamento em função de polinômios de Legendre

$$\sigma_s(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}' \to \hat{\Omega}) = \sigma_s(\overrightarrow{r}, \mu_0) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\sigma_{sl}(\overrightarrow{r})P_l(\mu_0)$$
(9)

Neste ponto, introduzimos a dependência espacial da seção diferencial de espalhamento e na equação (9), onde μ_0 é o cosseno do angulo de espalhamento; $\mu_0 = \Omega \cdot \Omega'$; P_l é o polinômio de Legendre de ordem l e σ_{sl} , os momentos das seção diferencial de espalhamento. Utilizando as propriedades de ortogonalidade dos polinômios de Legendre, os momentos σ_{sl} podem ser calculados como

$$\sigma_{sl}(\overrightarrow{r}) = \int_{-1}^{1} \frac{d\mu_0}{2} \sigma_s(\overrightarrow{r}, \mu_0) P_l(\mu_0).$$
(10)

Em diversas aplicações práticas, a expansão em polinômios de Legendre da dependência angular no termo de espalhamento é limitada a um termo (fonte isotrópica) ou a dois termos (fonte de espalhamento linearmente anisotrópica). Dessa forma, para

fonte de espalhamento isotrópica, a expansão da equação (9), considera apenas l = 0 e $P_0(\mu_0) = 1$, aparecendo então da seguinte forma o resultado

$$\sigma_s(\overrightarrow{r},\mu_0) = \sigma_{s0}(\overrightarrow{r}) \tag{11}$$

sendo

$$\sigma_{s0}(\overrightarrow{r}) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \sigma_s(\overrightarrow{r}, \mu_0) d\mu_0$$
(12)

Apresentamos a expansão em polinômios de Legendre para a dependência angular no termo de fonte de espalhamento, agora então iremos incorporar esta expansão a equação de transporte. Para isso, se faz necessário introduzirmos a equação (9), no termo de fonte de espalhamento da equação (7), na forma

$$S_{ex}(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \sigma_s(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}' \to \hat{\Omega}) \Psi(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}') = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sigma_{sl}(\overrightarrow{r}) \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' P_l(\hat{\Omega}'\cdot\hat{\Omega}) \Psi(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}')$$
(13)

A integral da equação (13) pode ser simplificada utilizando o teorema da adição de Legendre

$$P_l(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}) = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\hat{\Omega}) \cdot Y_{lm}(\hat{\Omega}')$$
(14)

onde Y_{lm} representa o harmônico esférico de ordem lm e o Y_{lm}^* o complexo conjugado de Y_{lm} . Vale ressaltar que, mais detalhes sobre a utilização dos harmônicos esféricos para simplificar a fonte de espalhamento, podem ser encontrados em (LEWIS; MILLER, 1984).

Continuando com as manipulações, substituindo então, a equação (14), na equação (13), obtemos

$$S_{ex}(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\sigma_{sl}(\overrightarrow{r}) \cdot \frac{1}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\hat{\Omega}) \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' Y_{lm}(\hat{\Omega}') \Psi(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}')$$
$$= \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_{sl}(\overrightarrow{r}) \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\hat{\Omega}) \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' Y_{lm}(\hat{\Omega}') \Psi(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}')$$
(15)

Podemos utilizar a integral da equação (15) para definirmos os coeficientes

$$\phi_l^m(\overrightarrow{r}) = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' Y_{lm}^*(\hat{\Omega}') \Psi(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}')$$
(16)

Substituindo agora a equação (16) em (15) obtemos

$$S_{ex}(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^*(\hat{\Omega}) \sigma_{sl}(\overrightarrow{r}) \phi_l^m(\overrightarrow{r})$$
(17)

Os coeficientes $\phi_l^m(\vec{r})$ definidos na equação (16), correspondem com os coeficientes da expansão do fluxo angular de nêutrons em harmônicos esféricos, isto é,

$$\Psi(\overrightarrow{r},\hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \phi_{l}^{m}(\overrightarrow{r}) Y_{lm}^{*}(\hat{\Omega}).$$
(18)

Por fim, substituindo a equação (17) na equação de transporte de nêutrons (7), obtemos

$$\hat{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}) + \sigma_t(\overrightarrow{r})\Psi(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} \sigma_{sl}(\overrightarrow{r}) Y_{lm}^*(\hat{\Omega})\phi_l^m(\overrightarrow{r}) + S_{ex}(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega})$$
(19)

Nessa dissertação focamos na resolução de problemas em geometria cartesiana unidimensional. Sabemos que a geometria cartesiana unidimensional é também conhecida como geometria de placa do inglês "slab geometry"e os problemas apresentam simetria em relação ao plano y,z (LEWIS; MILLER, 1984). Dessa forma, é comum fazermos o eixo z coincidir com o eixo x e o espaço de fase se reduz na forma

$$(x, y, z, \theta, \varphi)$$
 ou (x, y, μ, η, ξ) para (x, μ) (20)

o que graficamente é representado na Figura 4.



Figura 4 – Espaço de fase em geometria cartesiana unidimensional Fonte: Adaptado de: (LEWIS; MILLER, 1984)

Com isso, o termo de corrente $(\hat{\Omega} \cdot \nabla(\vec{r}, \hat{\Omega}))$ da equação (19) em geometria cartesiana unidimensional aparece da seguinte maneira

$$\hat{\Omega} \cdot \nabla(\overrightarrow{r}, \hat{\Omega}) = \mu \frac{\partial \Psi(x, u)}{\partial x}$$
(21)

Na geometria cartesiana unidimensional, a dependência angular é carregada apenas pelo cosseno diretor μ . Sendo assim, os coeficientes ϕ_l^m da equação (17) aparecem na forma

$$\phi_l^m(x) = \int_{-1}^1 d\mu' Y_{lm}(\mu') \Psi(x,\mu')$$
(22)

utilizando novamente a definição de harmônicos esféricos pode-se verificar que $\phi_l^m = 0$ para $m \neq 0$, então

$$\phi_l^0(x) = \phi_l(x) = \int_{-1}^1 \frac{d\mu'}{2} Y_{l0}(\mu') \Psi(x,\mu')$$
(23)

ainda utilizando a definição de harmônicos esféricos

$$Y_{l0}(\mu') = \sqrt{2l+1}P_l(\mu')$$
(24)

obtemos

$$\phi_l(x) = \sqrt{2l+1} \int_{-1}^1 \frac{d\mu'}{2} P_l(\mu') \Psi(x,\mu')$$
(25)

que também podemos verificar o complexo conjugado $Y^*_{lm}(\mu)$ para m = 0 é igual ao próprio harmônico, ou seja

$$Y_{l0}^* = Y_{l0}(\mu) \tag{26}$$

onde $Y_{l0}(\mu)$ foi definido na (24). Finalmente, substituindo as equações (24) e (26) no termo de fonte de espalhamento da equação (17), obtemos

$$S_{ex}(x,\mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \sqrt{2l+1} P_l(\mu) \sigma_{sl}(x) \sqrt{2l+1} \int_{-1}^{1} \frac{d\mu'}{2} P_l(\mu') \Psi(x,\mu')$$
$$= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2} \sigma_{sl}(x) P_l(\mu) \int_{-1}^{1} \Psi(x,\mu') d\mu'$$
(27)

Para encontrarmos a equação de transporte de nêutrons em geometria cartesiana unidimensional, basta substituirmos o espaço de fase apresentado na equação (20), o termo de corrente da equação (21) e o termo de espalhamento da equação (27), na equação (19), o resultado aparece como

$$\mu \frac{\partial \Psi(x,\mu)}{\partial x} + \sigma_t(x)\Psi(x,\mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{2} \sigma_{sl}(x) P_l(\mu) \int_{-1}^{1} P_l(\mu)' \Psi(x,\mu') d\mu' + S(x,\mu)$$
(28)

Considerando espalhamento isotrópico na equação (28) definimos o termo

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{1} \Psi(x,\mu') d\mu' = \phi(x) \quad onde \quad l = 0 \quad e \quad P_l(\mu) = 1$$
(29)

Sendo assim, aplicando as definições da ortogonalidade dos polinômios de Legendre e o termo de fluxo angular ($\phi(x)$) detalhado acima ,na equação (28), obtemos a seguinte equação de transporte de nêutrons

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x,\mu) + \sigma_t(x) \Psi(x,\mu) = \sigma_{s0}(x) \phi(x) + S(x)$$
(30)

Concluímos então essa seção, destacando que nessa dissertação utilizaremos a equação de linearizada de Boltzmann monoenergética, em geometria cartesiana unidimensional com espalhamento isotrópico, onde $x \in D = \{x \in \mathbb{R}; 0 \le x \le L\}$ e $\mu = [-1, 1]$.

Na próxima seção falaremos brevemente a respeito de métodos numéricos bem como sobre erros numéricos, com o intuito de conhecermos a respeito dessas técnicas pois elas facilitam e permitem encontrar soluções que não é possível obter analiticamente de maneira satisfatória.

2.2 Métodos numéricos

Os métodos numéricos correspondem a um conjunto de ferramentas ou métodos que são utilizados visando solucionar problemas ou modelos matemáticos de maneira aproximada. Podemos também entender métodos numéricos como técnicas pelas quais os problemas matemáticos desenvolvidos são resolvidos utilizando operações aritméticas (BURDEN; FAIRES, 2011).

Devido à popularização dos computadores pessoais com baixo custo de aquisição e alto poder de processamento, os métodos numéricos se apresentam como uma importante ferramenta para a solução de diversos problemas de diferentes áreas das Ciências e Engenharias. Além disso, o uso dessas técnicas é imprescindível para solucionar problemas em que as soluções são impraticáveis ou imprecisas do ponto de vista analítico ou muito custosa a respeito do tempo de execução. Na presente dissertação, como já dissemos anteriormente é bem custoso encontrarmos soluções envolvendo cálculos de transporte, dessa forma faz-se necessário nos atentarmos para os erros que podem ocorrer na fase da modelagem dos problemas.

A obtenção de uma solução numérica para um problema físico através da aplicação de métodos numéricos nem sempre nos permite obter valores compatíveis com o problema físico. A diferença entre o valor obtido (aproximado) e o valor exato é designado por erro. A introdução de erros na resolução do problema pode ocorrer devido a diversos fatores (RUGGIERO; LOPES, 2011). Como por exemplo, o pesquisador pode estar tentando modelar fenômenos reais e muitos modelos são idealizados pois para estudarmos fenômenos relacionados a natureza é necessário impormos condições que simplifiquem o problema, deixando o de maneira tratável. Podem ocorrer erros também na fase de coleta de dados, uma vez que, em algumas pesquisas é necessário parâmetros que muitas vezes são medidos experimentalmente e muitas vezes, exigem aproximações. Tais aproximações podem influenciar no resultado final.

Existem 2 tipos de erros associados ao uso de métodos numéricos para resolver um problema num computador ou calculadora: os erros de arredondamento e os erros de truncamento. Como consequência da ocorrência destes erros, as soluções numéricas obtidas são, em geral, soluções aproximadas. Para podermos avaliar quão próxima da solução exata está a solução aproximada calculada é necessário conhecer o seu erro.

Erros de arredondamento: Independente de como é realizado um cálculo, seja manualmente ou utilizando uma calculadora somos obrigados a utilizarmos uma aritmética de precisão finita, isto é, dispomos de uma quantidade finita de dígitos. O erro devido a desprezar os outros e arredondar o número é designado por erro de arredondamento.

Erros de truncamento: Muitas equações têm soluções que apenas podem ser construídas no sentido que um processo infinito possa ser descrito como limite da solução em questão. Por definição, um processo infinito não pode ser completado, por isso tem de ser truncado após certo número finito de operações. Esta substituição de um processo infinito por um processo finito, resulta num certo tipo de erros chamado erro de truncatura. Em muitos casos, o erro de truncatura é precisamente a diferença entre o modelo matemático e o modelo numérico (RUGGIERO; LOPES, 2011).

Uma vez discorrido sobre métodos numéricos e entendido o conceito de erros que serão usados nessa dissertação, na próxima seção descrevemos um método numérico para realizar a discretização da variável angular, descrito em (LEWIS; MILLER, 1984) como Método de Ordenadas Discretas S_N .

2.2.1 Método das Ordenadas Discretas

Nessa subseção descrevemos sucintamente o método de Ordenadas Discretas ou aproximação S_N . O método de Ordenadas Discretas foi desenvolvido por (CARLSON; LATHROP, 1968) e (CHANDRASEKHAR, 1960) e desde então vem sendo aprimorado e amplamente utilizado na modelagem determinística da equação de transporte de nêutrons. A principal ideia do método de ordenadas discretas consiste em substituir um domínio contínuo da variável angular μ , por um conjunto finito de valores μ_m e seus correspondentes pesos w_m , onde m = 1, ..., N, de maneira que os momentos angulares

do fluxo angular de nêutrons sejam aproximados por uma quadratura numérica

$$\phi_{(x)}^{l} = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} P_{l}(\mu_{n}) \Psi(x, \mu_{n}) \omega_{n}$$
(31)

Em problemas unidimensionais, a quadratura de Gauss-Legendre é frequentemente utilizada onde o conjunto de ordenadas discretas { μ_m } são os zeros dos polinomios de Legendre de grau N e o conjunto de pesos da quadratura { w_m } são escolhidos visando fazer com que a integral do polinômio de Legendre seja exata no intervalo.

Vale ressaltar que a principal característica dos polinomios de Legendre, está relacionada, a simetria que esses polinomios possuem em relação ao valor zero. Isso faz com que os valores de { μ_m } que considera os fluxos angulares de nêutrons dos lados direito e esquerdo tenham o mesmo peso, conforme ilustramos na Figura 5.



Figura 5 – Representação da simetria das ordenadas discretas em problemas unidimensionais

Fonte: Adaptado de Lewis e Miller (1984)

Dessa maneira, na presente dissertação faremos o uso da quadratura de Gauss-Legendre. Nessa quadratura, os pesos são obtidos resolvendo um sistema de equações gerado pela seguinte expressão

$$\omega_m = \frac{2(1-\mu_m)^2}{[(N+1)P_{N+1}(\mu_m)]^2}; \quad m = 1:N.$$
(32)

Com o intuito de ilustrar a quadratura de Gauss - Legendre, abaixo segue uma tabela com as ordenadas e pesos dessa quadratura:

	Ν	m	Ordenadas (μ_m)	Pesos (ω_m)
	2	1	0.5773502691	1.0000000000
	4	1	0.3399810435	0.6521451549
	4	2	0.8611363115	0.3478548451
	8	1	0.1834346424	0.3626837834
		2	0.5255324099	0.3137066459
		3	0.7966664774	0.2223810344
		4	0.9602898564	0.1012285363

Tabela 1 – Quadratura de Gauss - Legendre S_2, S_4 e S_8

Tais valores acima foram retirados de Lewis e Miller (1984) e Barros (1990), fazem observações que existem outros tipos de quadraturas angulares para realizar cálculos em ordenadas discretas.

Continuando então, com a nossa descrição da variável angular e substituindo as integrais da equação (30), obtemos

$$\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_m(x) + \sigma_t(x) \Psi_m(x) = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \sum_{n=1}^N \Psi_n(x) \omega_n + S_m(x)$$
(33)

onde $x \in D = \{x \in \mathbb{R} | 0 \le x \le L\}$, com as seguintes condições de contorno abaixo:

$$\Psi_m(0) = f_m \quad para \quad \mu_m > 0 \tag{34}$$

$$\Psi_m(L) = g_m \quad para \quad \mu_m < 0 \tag{35}$$

onde f_m e g_m são valores não-negativos conhecidos.

Uma vez discretizada a variável angular μ na equação (30), detalhamos agora procedimentos de discretização espacial. Dessa forma, devemos obter inicialmente as equações discretizadas de balanço espacial, dividindo o domínio D em células espaciais de comprimento h_i , i = 1, ..., I em que a seção de choque macroscópica total $\sigma_t(x)$, a seção de choque macroscópica de espalhamento isotrópica $\sigma_{s0}(x)$ e a fonte externa isotrópica $S_m(x)$ são constantes no interior de cada célula conforme ilustramos na Figura 6 abaixo

Figura 6 – Grade espacial para o domínio unidimensional D de comprimento L Fonte: (OLIVEIRA, 2007)

Sendo assim, podemos escrever então a equação (33) da seguinte maneira

$$\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_m(x) + \sigma_{t,i}(x) \Psi_m(x) = \frac{\sigma_{s0,i}}{2} \sum_{n=1}^N \Psi_n(x) \omega_n + S_{m,i}$$
(36)

De acordo com Barros (1990), para obtermos as equações discretizadas de balanço espacial de ordem l devemos aplicar o operador abaixo na equação (36)

$$\frac{(2l+1)}{h_i} \int_{x-\frac{1}{2}}^{x+\frac{1}{2}} P_l(\frac{2(x-x_i)}{h_i}) \bullet dx$$
(37)

nas equações S_N (36), onde $x_i = \frac{x_{i-\frac{1}{2}} + x_{i+\frac{1}{2}}}{2}$ e P_l é o polinômio de Legendre de grau l.

Aplicando o operador, representado na equação (37) com l = 0, obtemos as equações de balanço espacial de ordem zero

$$\frac{\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - \Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{\alpha_{m,i}} + \bar{\Psi}_{m,i} = \frac{C_{0,i}}{2} \sum_{n=1}^{N} \bar{\Psi}_{n,i} \omega_n + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}}$$
(38)

onde definimos $C_{0,i} = \frac{\sigma_{s0,i}}{\sigma_{t,i}}$ como razão de espalhamento e para facilitar a notação, chamamos $\alpha_{m,i} = \frac{h_i \sigma_{t,i}}{\mu_m}$.

Além disso, nas equações de balanço espacial definimos

$$\bar{\Psi}_{m,i} = \frac{1}{h_i} \int_{x-\frac{1}{2}}^{x+\frac{1}{2}} \Psi_m(x) dx$$

como sendo o fluxo angular médio na i-ésima célula espacial, na direção m.

A equação discretizada de balanço espacial (38) é completamente livre de erro de truncamento espacial citebarros. Contudo, o sistema de equações não são capazes de solucionar com unicidade a formulação de ordenadas discretas S_N , devido ao fato de que essas equações nos conduzem a sistemas de equações indeterminados em que o número de equações disponíveis é menor que o número de incógnitas (equações = N(I+2) < incógnitas N(2I+1)) . Noutras palavras, dado um fluxo angular conhecido, nós podemos calcular tanto os fluxos emergentes quanto o fluxo médio na direção m. Dessa forma, as equações de balanço devem ser acopladas a equações auxiliares que envolvam as incógnitas do problema, convertendo assim, os sistemas indeterminados em sistemas determinados, obtendo então solução única (OLIVEIRA, 2007).

Na seção seguinte, apresentamos algumas equações auxiliares de três métodos clássicos que são utilizadas na resolução de problemas de transporte S_N .

2.2.2 Métodos de diferenças finitas

Nessa seção apresentaremos os métodos de diferenças finitas mais conhecidos, a saber: Método Diamond Difference (DD), Método Step (também conhecido como método Degrau) e o Método Step Characteristic ou simplesmente Método Degrau Característico.

a) Método Diamond Difference (DD)

A equação auxiliar do método DD pode ser escrita da seguinte maneira

$$\bar{\Psi}_{m,i} = \frac{\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{2} \quad m = 1:N$$
(39)

em que o fluxo angular médio é a média aritmética entre os fluxos incidentes e emergentes na mesma direção. O método DD é um método de malha fina que obtêm bons resultados em problemas discretizados com um elevado número de células espaciais.

b) Método Step

A equação auxiliar do Método Step é dada por

$$\bar{\Psi}_{m,i} = \Psi_{m,i+\frac{1}{2}} \quad para \quad \mu > 0 \quad e \quad \bar{\Psi}_{m,i} = \Psi_{m,i-\frac{1}{2}} \quad para \quad \mu < 0$$
 (40)

onde o fluxo angular médio no interior do nodo é igual ao fluxo emergente na direção da varredura.

c) Método Step Characteristic

A equação auxiliar do Método Step Characteristic pode ser escrita como

$$\bar{\Psi}_{m,i} = \frac{(1+\theta_{m,i})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + (1-\theta_{m,i})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{2}$$
(41)

onde definimos $\theta_{m,i} = coth(\frac{\alpha_{m,i}}{2}) - \frac{2}{\alpha_{m,i}}$ sabendo que $\alpha_{m,i} = \frac{h_i \sigma_{t,i}}{\mu_m}$. O fluxo angular médio é calculado visando preservar a solução analítica do problema homogêneo.

Na subseção que segue, apresentamos o método iterativo SI (Source Iteration); pois é a partir da aplicação do método iterativo SI que conseguimos realizar a convergência nas soluções dos métodos de diferenças finitas aqui detalhados.

2.2.3 Solução numérica usando o esquema iterativo SI (Source iteration)

O esquema iterativo SI é frequentemente aplicado para realizar a convergência de solução numérica de métodos numéricos de malha fina para problemas de nêutrons monoenergéticos, nas formulações de ordenadas discretas com fonte fixa.

Dada uma grade de discretização espacial, determinamos os fluxos angulares médios nos intervalos das células que formam a grade espacial em função das estimativas da fonte que inclui espalhamento, a fonte fixa interior e dos fluxos angulares nas faces dos nodos nas correspondentes direções discretas incidentes no nodo. Com o intuito de compreendermos a dinâmica de como calculamos os fluxos angulares emergentes utilizando o esquema iterativo SI, se faz necessário definirmos o conceito de **varredura na grade** em problemas unidimensionais pois a partir desse esquema é possível resolver os sistemas de equações obtidos.

Inicialmente, devemos ter duas referências relacionadas a orientação horizontal, a saber: esquerda (E) e direita (D). Dessa forma, para as direções em que $\mu > 0$, varremos o domínio da esquerda para a direita $(E \rightarrow D)$ e para $\mu < 0$, varremos o domínio da direita para a esquerda $(D \rightarrow E)$, tendo assim, dois sentidos de varredura. A esse dois sentidos de duas varreduras, denominamos **varredura de transporte**. É importante salientar que, cada sentido da varredura de transporte está associado ao cálculo de fluxos angulares emergentes em uma direção correspondente. Uma vez realizada a varredura para $\mu > 0$ e para $\mu < 0$, varremos completamente o domínio e a esse conjunto de duas varreduras de transporte chamamos de **varredura na grade**.

As equações constitutivas dos métodos DD, Step e Step Characteristic em conjunto com os conceitos de varredura aqui descritos, nos permite determinar as equações das varreduras de transporte na grade de discretização espacial para o esquema iterativo SI. Considerando então cada sentido de varredura de transporte, estabelecemos uma associação conveniente entre as equações de balanço espacial e as equações destes métodos.

Para ilustrar toda a dinâmica aqui descrita, vamos calcular os fluxos angulares emergentes e incidentes, no sentido da varredura de transporte para todos os métodos estudados.

A equação de balanço de ordem zero é:

$$\frac{\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - \Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{\alpha_{m,i}} + \Psi_{m,i} = S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}}$$
(42)

onde

$$\alpha_{m,i} = \frac{h_i \sigma_{t,i}}{\mu_m}, \quad C_{o,i} = \frac{\sigma_{so,i}}{\sigma_{t,i}}, \quad S_{sc,i} = \frac{C_{o,i}}{2} \sum_{n=1}^N \Psi_{n,i} \omega_n.$$
(43)

Ressaltamos que a equação auxiliar do método Diamond Difference é dada pela equação abaixo:

$$\bar{\Psi}_{m,i} = \frac{\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{2}$$

Tendo como base a equação de varredura do método apresentada na equação (39), vamos reorganizá-la visando obter o fluxo emergente $\Psi_{m,i+\frac{1}{2}}$, para $\mu_m > 0$.

Assim, reorganizando a equação (39), temos:

$$\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} = 2\Psi_{m,i} - \Psi_{m,i-\frac{1}{2}}.$$
(44)

Substituindo a equação (44) na equação (42), temos:

$$\frac{2\Psi_{m,i} - \Psi_{m,i-\frac{1}{2}} - \Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{\alpha_{m,i}} + \Psi_{m,i} = S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},\tag{45}$$

$$2\Psi_{m,i} - 2\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}\Psi_{m,i} = \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(46)

$$(2 + \alpha_{m,i})\Psi_{m,i} = 2\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(47)

$$\Psi_{m,i} = \frac{2\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{2 + \alpha_{m,i}}.$$
(48)

Para ($\mu_m < 0$), fluxo emergente é: $\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}$.

Assim, reorganizando a equação (39), temos:

$$\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} = 2\Psi_{m,i} - \Psi_{m,i+\frac{1}{2}},\tag{49}$$

$$\frac{-2\Psi_{m,i} + \Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \Psi_{m,i+\frac{1}{2}}}{\alpha_{m,i}} + \Psi_{m,i} = S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(50)

$$-2\Psi_{m,i} + 2\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}\Psi_{m,i} = \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(51)

$$(-2 + \alpha_{m,i})\Psi_{m,i} = -2\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(52)

$$\Psi_{m,i} = \frac{2\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{2 - \alpha_{m,i}}.$$
(53)

A equação auxiliar do método Step é dada por:

$$\Psi_{m,i} = \frac{[1 + sgn(\mu_m)]\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + [1 - sgn(\mu_m)]\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{2}.$$
(54)

Dessa maneira, fazendo:

$$A = [1 + sgn(\mu_m)] \quad e \quad B = [1 - sgn(\mu_m)],$$

$$\Psi_{m,i} = \frac{A\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + B\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{2}.$$
(55)

As equações de varredura do Método Step são:

Para ($\mu_m > 0$), o fluxo emergente é: $\Psi_{m,i+\frac{1}{2}}$

Reorganizando a equação (55), temos:

$$\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} = \frac{2\Psi_{m,i} - B\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{A} = (\frac{2}{A})\Psi_{m,i} - (\frac{B}{A})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}},$$
(56)

Substituindo (56) em (42)

$$\frac{(\frac{2}{A})\Psi_{m,i} - (\frac{B}{A})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} - \Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{\alpha_{m,i}} + \Psi_{m,i} = S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(57)

$$(\frac{2}{A})\Psi_{m,i} - (\frac{B+A}{A})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}\Psi_{m,i} = \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(58)

$$(\frac{2}{A} + \alpha_{m,i})\Psi_{m,i} = (\frac{B+A}{A})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}\Psi_{m,i} = \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(59)

$$\frac{\Psi_{m,i} = (\frac{B+A}{A})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{(\frac{2}{A} + \alpha_{m,i})},$$
(60)

Porém, $B + A = 1 - sgn(\mu_m) + 1 + sgn(\mu_m) = 2$, logo

$$\Psi_{m,i} = \frac{(\frac{2}{A})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{(\frac{2}{A} + \alpha_{m,i})}.$$
(61)

Para ($\mu_m < 0$), o fluxo emergente é: $\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}$ Reorganizando a equação (55), temos:

$$\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} = \frac{2\Psi_{m,i} - A\Psi_{m,i+\frac{1}{2}}}{2} = (\frac{2}{A})\Psi_{m,i} - (\frac{A}{B})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}},$$
(62)

Substituindo (62) em (42), temos:

$$\frac{\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - (\frac{2}{B})\Psi_{m,i} - (\frac{A}{B})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}}}{\alpha_{m,i}} = S_{sc,i} + \frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(63)
$$(\frac{A+B}{B})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - \frac{2}{B}\Psi_{m,i} + \alpha_{m,i}\Psi_{m,i} = \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(64)

$$(\alpha_{m,i} - \frac{2}{B})\Psi_{m,i} = -(\frac{A+B}{B})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}},$$
(65)

$$\Psi_{m,i} = -\frac{(\frac{A+B}{B})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{(\alpha_{m,i} - \frac{2}{B})},$$
(66)

$$\Psi_{m,i} = \frac{(\frac{A+B}{B})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{(\frac{2}{B} - \alpha_{m,i})},$$
(67)

Entretanto, $A + B = 1 + sgn(\mu_m) + 1 - sgn(\mu_m) = 2$, logo

$$\Psi_{m,i} = \frac{(\frac{2}{B})\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{(\frac{2}{B} - \alpha_{m,i})}.$$
(68)

A equação auxiliar do método Step Characteristic é:

$$\Psi_{m,i} = [1 + \Theta_{m,i}\Psi_{m,i+\frac{1}{2}}] + [1 - \Theta_{m,i}\Psi_{m,i+\frac{1}{2}}]2$$

onde

$$\Theta_{m,i} = \coth(\frac{\alpha_{m,i}}{2}) - \frac{2}{\alpha_{m,i}}$$
(69)

Dessa maneira, fazendo,

 $D = [1 + \Theta_{m,i}]$ e $E = [1 - \Theta_{m,i}]$, temos:

$$\Psi_{m,i} = \frac{D\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} + E\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{2}.$$
(70)

As equações de Varredura são:

Para ($\mu_m > 0$), o fluxo emergente é: $\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}$ Reorganizando a equação (70), temos:

$$\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} = \frac{2\Psi_{m,i} - E\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{D} = (\frac{2}{D})\Psi_{m,i} - (\frac{E}{D})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}},\tag{71}$$

Substituindo a equação (71) na equação (42), temos

$$\Psi_{m,i} = \frac{(\frac{2}{D})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} + \alpha_{m,i}(S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}})}{(\frac{2}{D} + \alpha_{m,i})}.$$
(72)

Para ($\mu_m < 0$), o fluxo emergente é: $\Psi_{m,i+\frac{1}{2}}$

Reorganizando a equação (70), temos:

$$\Psi_{m,i-\frac{1}{2}} = \frac{2\Psi_{m,i} - D\Psi_{m,i-\frac{1}{2}}}{E} = (\frac{2}{E})\Psi_{m,i} - (\frac{D}{E})\Psi_{m,i-\frac{1}{2}},\tag{73}$$

Substituindo a equação (73) na equação (42), temos

$$\Psi_{m,i} = \frac{\left(\frac{2}{E}\right)\Psi_{m,i+\frac{1}{2}} - \alpha_{m,i}\left(S_{sc,i} + \alpha_{m,i}\frac{S_{m,i}}{\sigma_{t,i}}\right)}{\left(\frac{2}{E} - \alpha_{m,i}\right)}.$$
(74)

Tendo como base, as estimativas para os fluxos incidentes nos nodos e as fontes no interior deles, calculamos os fluxos que são emergentes dos nodos nos sentidos das varreduras de transporte. No método de iteração SI, a fonte de espalhamento é mantida constante para cada varredura na grade. Após finalizarmos a varredura na grade, devemos efetuar o teste de convergência. Por convenção, este teste é feito estabelecendo um critério de convergência para o termo de fonte de espalhamento. Caso o esquema convirja, abandona-se as iterações; senão é necessário atualizarmos a fonte de espalhamento e realizarmos uma nova varredura na grade aplicando novamente o teste de convergência. Sendo assim, esse esquema iterativo irá se repetir até que algum critério de convergência seja satisfeito. Abaixo apresentamos na Figura 7, o fluxograma dos métodos aqui estudados.



Figura 7 – Fluxograma dos métodos numéricos estudados Fonte: Criado pelo próprio autor

No próximo capitulo, discorremos sobre os conceitos a respeito de seção de choque bem como os materiais que serão utilizados para a resolução dos problemas apresentados no capitulo 5.

3 Seção de choque

Nesse capítulo visamos enunciar conceitos importantes para a compreensão dessa dissertação, a saber: seção de choque macroscópica, seção de choque microscópica e o conceito de livre caminho médio do nêutron. A compreensão desses conceitos são imprescindíveis para a análise dos problemas modelos que serão discutidos no capitulo 5. Após termos apresentados esses conceitos, na seção que segue, apresentamos materiais que irão compor as regiões dos problemas modelos abordados no capitulo 5.

3.1 Seção de choque microscópica

A probabilidade de que ocorra uma reação nêutron - núcleo é caracterizada por uma grandeza denominada seção de choque nuclear. Inicialmente, definimos essa quantidade operacionalmente, considerando um feixe de nêutrons, todos viajando com a mesma velocidade e direção que incide normalmente em cima sendo uniforme em toda a face de um alvo natural (DUDERSTADT; HAMILTON, 1975). Se o alvo é suficientemente fino (por exemplo, uma camada atômica de espessura) então não há núcleos no alvo e será protegido por outros núcleos do feixe incidente de nêutrons, conforme ilustramos na figura abaixo:



Figura 8 – Um feixe incidente de nêutrons monoenergéticos em direção a um alvo fino. Fonte: Duderstadt e Hamilton (1975)

Nesse caso, seria de se esperar que a taxa de reações nêutron - núcleo no alvo será proporcional tanto a intensidade incidente no feixe de nêutrons I (em unidade de número de nêutrons $/cm^2 \cdot seg$) e o número de átomos alvo por unidade de área (N_A número de átomos (*)/ cm^2). Se chamarmos a constante de proporcionalidade σ podemos escrever a taxa em que as reações ocorrem por unidade de área no alvo como

$$R = \left(\frac{*}{cm^2}\right) = \sigma(cm^2 \cdot s)I\left(\frac{*}{cm^2 \cdot s}\right)N\left(\frac{*}{cm^2}\right)$$
(75)

Indicamos na equação acima, as unidades de cada uma dessas quantidades, uma vez que, implica que o fator de proporcionalidade deve ter as unidades de uma área. Podemos então, a partir das definições apresentadas, entender que, a probabilidade da reação tem um pequeno relacionamento com o tamanho físico real, dessa forma, a unidade da seção de choque deve ser relacionada aproximadamente à área da seção transversal de um núcleo ($A = \pi r^2$) pois o raio nuclear é aproximadamente igual a 10^{-12} cm. A unidade de seção de choque 1 barn foi definida como sendo uma área de 10^{-24} cm². Então a constante de proporcionalidade σ pode ser interpretada como a área virtual (área da seção transversal) que um determinado núcleo apresenta para um determinado tipo de reação nêutron - núcleo. Podemos concluir então, que a seção de choque microscópica está relacionada com a probabilidade por núcleo que um nêutron interagirá de alguma forma com tal núcleo (DUDERSTADT; HAMILTON, 1975).

Sabemos que um núcleo pode sofrer diversos tipos de reações nucleares. Dessa forma, para cada tipo de reação nuclear, existe uma seção de choque correspondente que é uma característica do núcleo alvo, sendo no entanto, dependente da energia do nêutron incidente. A seção de choque total de um núcleo alvo com nêutrons de determinada energia é a somatória das seções de choque individuais para cada tipo de reação nuclear. A seção de choque total é usualmente dividida em duas grandes componentes que são relativas às reações de absorção e reações de espalhamento, conforme ilustramos na figura que segue :



Figura 9 – Hierarquia da seção de choque de nêutrons Fonte: Duderstadt e Hamilton (1975)

Assim podemos escrever a seção de choque microscópica total como:

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a = (\sigma_e + \sigma_{in}) + (\sigma_f + \sigma_\gamma + \sigma_{n,\alpha} + \dots). \tag{76}$$

Onde,

- σ_t representa a seção de choque microscópica total.
- σ_s representa a seção de choque microscópica de espalhamento.
- σ_a representa a seção de choque microscópica de absorção.
- σ_e representa a seção de choque microscópica de espalhamento elástico.
- σ_{in} representa a seção de choque microscópica de espalhamento inelástico.
- σ_f representa a seção de choque microscópica de fissão.
- σ_{γ} representa a seção de choque microscópica de raios gama.
- $\sigma_{n,\alpha}$ representa a seção de choque microscópica captura radiativa.

Na próxima seção definiremos conceitos a respeito da seção de choque macroscópica estabelecendo diferenças entre seção de choque microscópica e seção de choque macroscópica, além de conceituarmos o que entende-se por livre caminho médio de nêutrons pois vale ressaltar mais uma vez que esses conceitos são fundamentais para o entendimento dos problemas modelos apresentados no capitulo 5.

3.2 Seção de choque macroscópica e livre caminho médio

Até agora nós consideramos somente a seção de choque para um núcleo individual, denominada por seção de choque microscópica (σ). O mundo real, entretanto, está raramente interessado com a reação entre um nêutron e um núcleo simples mas sim com as reações entre um número de nêutrons e um alvo contendo bilhões de núcleos.

De acordo com Duderstadt e Hamilton (1975), a seção de choque macroscópica é definida como o produto entre a seção de choque microscópica do isótopo para que uma determinada reação ocorra com nêutrons de certa energia e a densidade volumétrica do número de isótopos *N* que está presente no meio hospedeiro:

$$\Sigma(cm^{-1}) = \sigma(cm^2) N\left(\frac{*}{cm^3}\right)$$
(77)

onde a seção de choque macroscópica total é expressa em cm^{-1} .

A seção de choque macroscópica está relacionada com a probabilidade de um nêutron migrar num meio hospedeiro com uma determinada população de isótopos e sofrer um determinado tipo de reação. Quanto maior for a seção de choque macroscópica do meio hospedeiro, menor será a distância percorrida pelo nêutron até que a interação nêutron - núcleo ocorra. E a distância média (λ) percorrida antes que o nêutron interaja com um núcleo atômico, aparece matematicamente como,

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma_t} \tag{78}$$

também conhecido como "recorrido livre médio do nêutron".

Como na seção anterior definimos o que entende-se por seção de choque microscópica, seria interessante discutirmos sobre as principais diferenças entre seção de choque microscópica e seção de choque macroscópica. Assim, Σ representa, no contexto dessa dissertação, a probabilidade de interação com uma região macroscópica da matéria (considera a densidade do meio + tipo de núcleo), já σ representa a probabilidade de interação com um único núcleo (considera as características do núcleo). Da mesma forma que as seções de choque microscópicas, as seções de choque macroscópicas são definidas para cada tipo de reação e cada tipo de núcleo (DUDERSTADT; HAMILTON, 1975). Podemos definir:

• $\Sigma_f = N\sigma_f$ - representa a seção de choque macroscópica de fissão.

- $\Sigma_a = N\sigma_a$ representa a seção de choque macroscópica de absorção.
- $\Sigma_s = N\sigma_s$ representa a seção de choque macroscópica de espalhamento.
- $\Sigma_t = N\sigma_t = \Sigma_a + \Sigma_s$ representa a seção de choque macroscópica total.

Após discorrermos sobre seção de choque macroscópica, microscópica, livre caminho médio, percebemos realizando uma revisão de literatura que os cálculos para determinação de seções de choque são excessivamente complexos e os valores usados são baseados em bibliotecas de dados nucleares. Dessa maneira, para realizarmos pesquisas que envolvem o uso desses conceitos faz-se necessário ou medirmos experimentalmente ou recorrermos a valores ja existentes em livros que possuem esses valores tabulados. Vale ressaltar novamente que, nesse trabalho, utilizaremos a letra grega sigma minuscula (σ) para denotar a seção de choque macroscópica total, visando evitar ambiguidade com os somatórios presentes nas equações que são representados pela letra maiúscula sigma (Σ). Nessa dissertação utilizaremos valores que estão dispostos em Lamarsh e Baratta (2001) e na próxima seção apresentamos valores referente as seções de choque dos materiais que foram utilizados nos problemas modelos do capitulo 5.

3.3 Materiais

Nessa seção apresentamos inicialmente a Tabela 2 que identifica cada elemento químico e sua respectiva seção de choque macroscópica de espalhamento, seção de choque macroscópica total e logo em seguida apresentamos informações breves a respeito desses elementos. Gostaríamos de salientar que a escolha desses materiais para serem utilizados nos problemas modelos que serão apresentados e discutidos no capitulo 5, se devem aos valores apresentados pela seção de choque de espalhamento e seção de choque total, uma vez que, estamos investigando problemas relacionados a blindagem e as informações referente as seções de choque aqui citadas são relevantes. Todos os valores apresentados na Tabela 2 estão disponíveis em Lamarsh e Baratta (2001) e em outras referências sendo válidos para nêutrons térmicos. Os elementos Platina e Vanádio, foram considerados como "materiais neutros" porque a seção de choque macroscópica e seção de choque macroscópica total são bem próximas de ambos materiais. Já o elemento Ferro, possui uma seção de choque de espalhamento maior que a de absorção, como podemos perceber na Tabela 2, assim nós o consideramos como um material espalhador e pela mesma justificativa, consideramos o elemento Níquel como espalhador. O Boro e o Manganês, por sua vez, são considerados materiais absorvedores, uma vez que sua seção de choque de absorção é muito maior que a seção de choque de espalhamento, facilmente verificável utilizando a Tabela 2.

Material	σ_t	σ_s	Tipo do material
Boro	97.6912	0.4612	Absorvedor (ABS)
Ferro	1.1415	0.9251	Espalhador (ESP)
Manganês	1.2540	0.1710	Absorvedor (ABS)
Níquel	1.9835	1.5790	Espalhador (ESP)
Platina	1.3387	0.7167	Neutro (NE)
Vanádio	0.7191	0.3556	Neutro (NE)

Tabela 2 – Classificação dos materiais

i) Boro: O Boro constitui 0,001 % da crosta terrestre. É um elemento presente na natureza em forma de seus boratos encontrados nos oceanos, rochas sedimentares, carvão, xista. O boro é um elemento que tem propriedades metálicas e não metálicas por se tratar de um metaloide, inodoro e de aparência sólida, porém pode apresentar a aparência de um pó de cor marrom, é considerado um material quebradiço apesar de ser muito duro (PEIXOTO, 1996). As reservas minerais do boro são extremamente valoradas possuindo a Turquia como principal produtor com 50%, seguida por Estados Unidos da América com 35% e o Brasil, juntamente com os países da América do Sul, somam juntos 11%. O Boro é utilizado em diversos produtos manufaturados na medicina, para armazenar resíduos nucleares e exploração espacial. Os compostos de boro possuem uma grande aplicabilidade nas industrias de vidros como borosilicato, na agricultura em fertilizantes, na indústria de limpeza em detergente e de inibidores de fogo (ANDIA, 2009). No ramo da engenharia nuclear, o isotopo mais leve do Boro tem uma grande seção de choque para nêutrons térmicos e por essa razão alguns dos compostos de boro tem como principal aplicação a blindagem de nêutrons. Além disso, em reatores nucleares atua como um protetor da radiação nuclear (ANDIA, 2009).

ii) Ferro: O Ferro é o metal de transição mais abundante da crosta terrestre dentre todos os elementos, ocupa o quarto lugar no quesito abundância, possuindo a representatividade de 5%. O ferro é encontrado em muitos minerais e os principais são: a magnetita, a goethita, a siderita, a pirita e a ilmenita. A terminologia "minério de ferro"é usada para diversos materiais e sob a ótica da economia está relacionada a materiais que são explorados comercialmente em função do seu conteúdo ferro (FREITAS, 2014). As jazidas de Ferro foram formadas em períodos geológicos muito antigos sendo possível encontrá-las em todas as épocas geológicas. Os principais países produtores de miné-rio de ferro são Austrália Brasil, China, Índia, sendo dominado por Brasil e Austrália segundo o Departamento Nacional de Produção Mineral (DNPM). Devido as suas propriedades químicas e físicas, o ferro em sua maioria, possui grande aplicabilidade na industria siderúrgica, sendo importante destacar que comparado a outros metais o ferro é um fraco condutor de eletricidade. Além de aplicações em indústrias siderúrgicas, o ferro pode ser usado como carga na indústria de ferro-liga, cimento e ocasionalmente na construção de estradas. Os preços do minério de ferro, assim como outras commodities como níquel e cobre, estão sujeitos à volatilidade. Em 2014, de acordo com o Instituto Brasileiro de Mineração - (IBRAM, 2014) ficou por volta de US70, 00/t.

iii) Manganês: O manganês é o décimo segundo elemento mais abundante na costa terrestre é um metal de transição que possui coloração variada (geralmente prateado metálico) e representatividade de 0.09%. O manganês não é encontrado em seu estado elementar na natureza, podendo ser encontrado somente na forma de compostos com outros elementos (ALMEIDA, 2010). Podemos encontrar amplamente na crosta terrestre os minerais de manganês, sendo formados por óxidos, hidróxidos, silicatos e carbonatos. Ainda em Almeida (2010), esse autor relata que no Brasil, o manganês é um recurso natural que possui uma grande importância, devido as reservas existentes bem como a produção de ferroligas e aço uma vez que, nesse quesito, o manganês é tido como matéria-prima indispensável pois não existe até o momento, um substituto adequado para o seu emprego. Além de aplicações em ferroligas, o manganês pode ser utilizado em pilhas, ração animal, uso de vitaminas para humanos e vidros. Os países: África do Sul, Austrália, Brasil, China, Índia, Gabão e Ucrânia detêm 98.3% do total das reservas mundiais, de acordo com (DNPM, 2015). Consta ainda, em (DNPM, 2015), que a produção brasileira estimada de concentrado de manganês atingiu a 2,7 milhões de toneladas em 2014. A respeito do preço, o (DNPM, 2015) realiza um anuário mineral brasileiro de produção que consta os valores monetários a respeito desse elemento químico e em 2014, o preço médio do manganês chegou a US111, 00/t.

iv) Níquel: O Níquel é o vigésimo - segundo elemento mais abundante em peso na crosta terrestre, é um metal brilhante, metálico e prateado com uma coloração dourada. Os minerais de níquel são: os sulfetos (milerita e pentlandita) que se apresentam associados a outros sulfetos metálicos em rochas básicas, freqüentemente acompanhados de cobre e cobalto. O níquel é resistente à corrosão e conserva suas propriedades físicas e mecânicas mesmo quando submetido a temperaturas extremas. A Rússia é a maior produtora de Níquel, seguida por Indonésia, Filipinas e Canadá. O Brasil em 2014 ocupou a posição da sexta colocação em produção desse metal de acordo com o (DNPM, 2015). O níquel possui diversas aplicações em diferentes setores industriais seja ele na sua formulação pura ou na forma de liga com outros metais (IMBELLONI, 2013). Grande parte do níquel obtido é usado em ligas com ferro e aço, cobre e cromo e na produção de baterias. Além das baterias, o níquel também se faz presente no controle remoto, na confecção de moedas bem como a produção de carros. A cotação do metal na LME London Metal Exchange - LME , em 2014 estava em cerca de US\$20.550/t.

v) Platina: Os metais platina, paládio, ródio, rutínio, irídio e ósmio compõem os elementos do grupo da Platina, por comumente ocorrerem associados na natureza e possuírem características físico-químicas semelhantes e coloração branco acinzentado. As reservas mundiais são abundantes mas a produção dos metais do grupo da Platina ficam restrita a poucos países, sendo eles: África do Sul (95.5%), Rússia, Estados Unidos e Canadá (DNPM, 2015). O Brasil possui algumas reservas porém em menores proporções comparada as reservas presentes nesses países citados anteriormente (FRIZZO, 1991). Grande parte da Platina e do Paládio produzidos em escala mundial são utilizados na produção de catalisadores para escape de veículos automóveis. O restante é utilizado em diversas áreas como: medicina, odontologia, produção de joias, industria petroquímica , industria eletrônica. O uso tanto da platina quanto do paládio em alguns setores da indústria se justifica porque esses elementos são bastante resistentes a corrosão, mesmo sujeito a altas temperaturas bem como, são bastante dúcteis e maleáveis. De acordo com DNPM (2015), a produção mundial da Platina atingiu 192 toneladas em 2013. A respeito do preço, o DNPM (2015) realiza um anuário mineral brasileiro de produção que consta os valores monetários a respeito desse elemento químico, em 2013, o preço médio da platina chegou a US\$1.677, 46/troy oz.²

vi) Vanádio: O Vanádio é um elemento abundante na natureza mas não é encontrado em sua forma elementar. O vanádio está presente em aproximadamente 152 minerais diferentes onde destaca - se a vanadinita (PB₅(VO₄)₃Cl) e a carnotita ($K_2(UO_2)_2(VO_4)_2$ · 3H₂O), além disso, o vanádio também pode ser encontrado na bauxita, em minas de carvão, óleos crus ou no petróleo, sendo encontrado também em rochas vulcânicas (BOLSONI, 2011). As maiores fontes de vanádio são os minérios magnetita e titanoferrosos encontrados principalmente na Austrália, China, Rússia e África do Sul. Em 2014, a produção mundial de minério, em que o vanádio ocorre como coproduto ou subproduto, atingiu 78,6 kt, mantendo-se no mesmo patamar do ano de 2013 (DNPM, 2015). As principais aplicações do vanádio encontra-se na indústria aeroespacial pois possui baixa densidade, força e resistência para operar a altas temperaturas permitindo por exemplo que seja utilizado na fabricação de turbinas, compondo por exemplo, a liga titânio - alumínio - vanádio. Bolsoni (2011) destaca que pesquisadores da área academica estudam muito o material vanádio devido a sua capacidade para armazenar energia, bem como, a produção de catalisadores eficientes. Por fim, o vanádio também pode ser aplicado como matéria prima na produção de materiais cirúrgicos, ferramentas.

Esses materiais apresentados na Tabela 2 serão utilizados na composição dos problemas modelos do capitulo 5, dessa forma se faz necessário calcularmos o livre caminho médio do nêutron para cada material listados na Tabela 2 pois é a partir dele que podemos classificar as células de discretização em finas, médias e grossas. Para calcularmos o livre caminho médio do nêutron utilizamos a equação 78, com base nas propriedades físico materiais listadas na Tabela 2. Assim, abaixo apresentamos na Tabela

²No sistema troy (relativo a metais preciosos e gemas, assim como medicamentos) a onça vale 31,1034768 gramas

3 os resultados do livre caminho médio no nêutron para cada material físico:

Material	Livre Caminho Médio do Nêutron (cm)
Boro	0.010236
Ferro	0.876040
Manganês	0.797448
Níquel	0.504159
Platina	0.746993
Vanádio	1.390627

Tabela 3 – Livre Caminho Médio do nêutron para os materiais listados nessa seção

No próximo capitulo, apresentamos algumas aplicações de blindagem como técnicas de "well logging"e "logging while drilling", descritas em (SCHULZ, 2014) visando a prospecção de gás e petróleo e já na sequência apresentarmos um breve histórico desde os primeiros experimentos relacionados a blindagem até os sofisticados experimentos computacionais.

4 Aplicações - problemas de fonte fixa

4.1 Petróleo

O petróleo é uma substância encontrada armazenada ou embebida em rochas subterrâneas e que seu uso atual serve tanto para ser queimada ou refinada para a produção de gasolina, querosene, diesel, etc. Ele é constituído em sua maioria de hidrocarbonetos e em menores proporções possui contaminantes (enxofre, nitrogênio, oxigênio e metais). Acredita-se que o petróleo já fazia parte do cotidiano do ser humano dede os tempos bíblicos. Na antiga Babilônia, os tijolos eram assentados em asfalto e o betume era frequentemente utilizado pelos fenícios na calafetação de embarcações. No Novo Mundo, os incas, maias e outras civilizações antigas também estavam bem familiarizados com o petróleo e se aproveitando dele para diferentes fins (THOMAS, 2001).

Sabe-se que o processo de extração de gás e petróleo é algo variável porque tem relação direta com a profundidade que esse material se encontra, uma vez que, o material pode estar há milhares de metros abaixo do nível do mar ou nas primeiras camadas do solo. Assim, para saber o potencial de uma jazida de petróleo é necessário estudos e avaliações de formações das atividades com o objetivo de definir em termos quantitativos e qualitativos o quanto aquela jazida pode ser produtiva aliado ao seu potencial comercial (THOMAS, 2001).

Os dados de perfis geofísicos recebem uma atenção especial porque o uso preciso das informações obtidas pelo uso desses perfis, permitem identificar contribuições importantes que auxiliam na tomada de decisão para a exploração e produção de hidrocarbonetos. Além disso, é através da análise de perfis geofísicos que permite aos engenheiros, geofísicos e geólogos identificar os fluidos presentes nas formações ou zonas de interesse (MIRANDA, 2004). As informações obtidas são indispensáveis para o sucesso das operações, segurança do poço bem como resultados satisfatórios.

Sendo assim, faz-se necessário tanto na prospecção como também na exploração de um poço de petróleo utilizarmos técnicas nucleares de medição, diretas e indiretas. Tais técnicas são fundamentais para detectar as características do solo e suas formações rochosas com o objetivo de avaliar a ocorrência de quantidades comerciais dos preciosos insumos energéticos como o óleo e o gás (SCHULZ, 2014).

Uma técnica chamada "well logging"é bastantemente utilizada na operação da exploração do petróleo. A palavra "logging"é um termo geral que significa fazer registro de algo. Assim, "weel logging"significa registro das medições encontradas ao longo de

um poço aberto para prospecção das características do solo perfurado (ELLIS; SINGER, 2007). Os objetivos principais dessa técnica são: identificar a formação e fluido nas formações geológicas, a correlação entre os buracos e a avaliação da produtividade da capacidade de formação de reservatórios.

De acordo com Schulz (2014), um processo importante na exploração de petróleo, diz respeito a perfilagem do poço, que nada mais é do que a operação de registro das características físicas das formações geológicas e dos fluidos, essa perfilagem pode ser obtida através de sensores apropriados que podem ser cabos elétrico ou através da técnica chamada LWD "logging while drilling". O LWD, pode transmitir os dados para a superfície em uma base em tempo real ou armazenar os dados em uma memoria no fundo do poço, a partir da qual ele pode ser baixado quando o conjunto é trazido de volta a superfície (DARLING, 2005). Nos atentaremos as técnicas nucleares utilizadas no "Well logging"pois essa técnica envolve nêutrons, partículas que são de interesse nessa dissertação.

Depois de todos os processos realizados, uma vez identificado e aberto o poço pioneiro são introduzidas sondas, que possuem formato cilíndrico de 10 cm de diâmetro podendo ser menor e podem percorrer perfurações de até 15 cm de diâmetro, com vários sensores, varrendo todo a extensão perfurada visando obter sinais elétricos que traduzem algumas grandezas de interesse como argila, porosidade, densidade, resistividade que caracterizam as paredes do subsolo perfurado (SCHULZ, 2014). Na superfície é construída uma estação de tratamento que possui todo o aparato computacional necessário para o êxito no uso dessas sondas.

As companhias de óleo vem investindo, cada vez mais, no uso de diversos materiais visando a melhoria dos poços de petróleo e nessa perspectiva, segundo Servor, John e Hoogenboom (1998), os contornos comumente usados nos postos de petróleo são constituídos de aço, sendo assim, a utilização de fontes de radiação de nêutrons ou fótons aparecem como uma solução viável para a perfuração no poço de petróleo, uma vez que, por ser de aço, não é possível o acesso convencional da coleta de óleo.

As sondas usadas na técnica do "Well Logging"possuem natureza elétrica, nuclear e acústica. Daremos um destaque para a natureza nuclear uma vez que está intimamente ligada a partículas neutras e faz parte do enfoque desse trabalho.

As medidas de natureza nuclear são oriundas do uso de fonte de nêutrons nas sondas que fazem o "Well Logging". Para essas medidas serem obtidas, são utilizados raios gama produzidos através da interação dos nêutrons com os elementos que constituem as rochas que estão ao redor da fonte de nêutrons e a atenuação que os nêutrons experimentam quando atravessam as camadas das rochas interpostas entre a fonte e os detectores. A presença de hidrocarbonetos podem ser identificada devido as interações entre nêutrons de alta energia e átomos de qualquer material, uma vez que, ocorre a redução de energia quando os átomos de hidrogênio se fazem presentes na estrutura circuncidante pois o espalhamento causado é notado. Contudo, esse fato não garante que os hidrocarbonetos existentes estão ligados somente a óleo e gás, que são os materiais de interesse pois é importante destacar que esta atenuação da energia é resultante da iteração com todos os átomos de hidrogênio que ali se encontram, esses átomos de hidrogênio podem estar associados aos sedimentos argilosos (ELLIS; SINGER, 2007). Dessa maneira, é importante salientar também que essas interações entre nêutrons de alta energia com os átomos materiais constituintes das rochas próximas excitam alguns núcleos dos átomos desses materiais que geram raios gamas característicos e uma espectropia de raios gama identificam os elementos presentes na rochas circuncidantes e a composição da rocha reservatório.

Os autores Ellis e Singer (2007), descrevem que a análise dessa interação dos átomos de alta energia e a rocha permite a determinação direta dos átomos de carbono e oxigênio, onde pode-se inferir na composição do material orgânicos (carbono, oxigênio e hidrogênio) existente e sua provável composição tendo como base a comparação com as proporções conhecidas nos fluidos de interesse comercial.

Sendo assim, cabe enfatizar que para o petróleo ser explorado é necessário várias técnicas que envolvem diversos processos e profissionais, contudo, visamos com essa breve explanação sobre técnicas de prospecção mostrar a aplicabilidade da equação de transporte de nêutrons, uma vez que a técnica "Well Logging"pode ser modelada utilizando essa equação (SCHULZ, 2014).

4.2 Blindagem

Os últimos anos do século XIX e os primeiros do século XX foram marcados pela descoberta dos raios-x e da radioatividade, tais descobertas revolucionaram as teorias atômicas estabelecidas na época. Essas descobertas também estimularam muitas pesquisas na área de blindagem com o objetivo de entender os fenômenos ali presente bem como as aplicações dessa descoberta.

Na época da descoberta da radioatividade os cientistas da época não conheciam seus efeitos prejudiciais aos tecidos dos seres vivos e esses efeitos começaram a se manifestar muitas vezes de maneira trágica. Vendo isso, procurou-se proteger o ser humano contra estas radiações utilizando um material absorvedor entre a fonte radiativa e a pessoa ou objeto que se desejava proteger, de maneira que, a intensidade da radiação fosse atenuada até níveis não danosos (SILVA, 2010).

De acordo com Gavazza (1986), o primeiro uso de uma blindagem que se tem

noticia, ocorreu quando o doutor Emil Herman Grubbe tratou um paciente com aplicações de raios-x, no ano de 1896. Foi utilizado chumbo para proteger as partes do corpo desse paciente que não deveriam ser irradiadas (GRUBBÉ, 1933).

É importante salientar que o uso de radiações em humanos era realizada sem o material de blindagem adequado, uma vez que, não existiam estudos consistentes a respeito dos materiais que deveriam ser utilizados na aplicação de raios-x. Com o passar do tempo e a utilização cada vez mais frequente de radiação em seres humanos, os estudiosos perceberam os danos causados pela mesma e através de experiências identificaram que materiais pesados eram bons para blindagem dos raios-x e o uso desses se tornaram bastante comum no inicio do século XX (SILVA, 2010). Destaca-se que até esse momento, apenas eram conhecidos fatores exponenciais de atenuação, camadas semi-redutoras e alguns coeficientes de absorção.

Um marco importante no estudo de blindagem se dá, quando o físico inglês James Chadwick (discípulo de Rutheford), em 1932, utilizando sua experiencia de conservação de quantidade de movimento, descobre os nêutrons. Aliada a essa descoberta, o surgimento dos aceleradores de partículas carregadas bem como a criação de reatores nucleares e fontes de nêutron, deram uma ênfase maior no estudos na área de blindagem. Esses marcos, juntamente com o avanço na tecnologia fizeram com que estudiosos percebessem que materiais mais densos eram bons atenuadores de raios gama e que os materiais hidrogenados eram bons atenuadores de nêutrons, além de se atentarem para a consistência dos estudos que estavam sendo realizados pois considerar apenas atenuação exponencial em termos de seção de choque total se mostraram técnicas muito básicas para o cálculo da radiação na matéria.

Outro fato importante no estudo de blindagem, ocorreu por volta dos anos 40, 50 dando maior consistência e confiabilidade a pesquisas na área de blindagem com a aplicação na energia nuclear em transformações em energia elétrica bem como o uso na industria naval (OTTO, 1983). Esses estudos possibilitaram que a blindagem se tornasse uma área especifica na engenharia nuclear.

Sabemos que uma fonte de radiações nucleares pode ser composta por diversos tipos de radiações, a saber: partículas α , β , neutrinos, fragmentos de fissão, nêutrons e radiação gama. É necessário que as radiações provenientes dessas fontes de radiações sejam absorvidas ou atenuadas de maneira eficaz na blindagem para que se possa trabalhar de maneira segura. Frequentemente, no inicio da blindagem são freadas as partículas α , β e os produtos de fissão. Já em relação aos neutrinos, o fato deles serem altamente penetrantes fazem com que eles atravesses a blindagem sem serem afetados e esse fato faz com que a probabilidade de iteração com os materiais, incluindo os tecidos humanos sejam muito pequena, não havendo então probabilidade de danos biológicos (SILVA, 2010). Os raios-x, raios gama e nêutrons apresentam uma maior

probabilidade de penetrar e interagir com os materiais e os meios no qual eles estão envolvidos, sendo assim, materiais que atenuem essas 3 radiações ultimamente citadas, atenuarão as outras de maneira consistente e eficaz; portanto de acordo com Gavazza (1986) o problema se reduz a atenuação de nêutrons e fótons, nos concentrando então em cálculos de blindagem que envolvam essas partículas.

Para uma fonte emissora de nêutrons como descrevemos no parágrafo anterior, são necessários cálculos eficientes e consistentes e isso envolve cálculos de penetração de nêutrons e raios gama nos materiais que estão ao redor da fonte, por isso, é tão importante a determinação no que diz respeito a distribuição energética de nêutrons e raios gama em um meio, uma vez que através dessa distribuição podemos calcular as taxas de doses e avaliar os danos provocados por essas radiações no meio considerado. Segundo Otto (1983), a determinação dessa distribuição implica no conhecimento de parâmetros que descrevam a interação da radiação e também de modelos matemáticos adequados que descrevam o comportamento desta no meio considerado.

Segundo Tauahata, Salati e Prinzio (2014), os materiais utilizados para blindagem contra nêutrons, normalmente possuem baixo número atômico, para evitar o espalhamento elástico que, ao invés de atenuar, espalharia os nêutrons em todas as direções. Os materiais mais usados em blindagem são a água, a parafina borada, o grafite e o concreto. Esses autores também destacam, que em alguns casos, materiais de alto número atômico também são utilizados para absorver nêutrons como o cádmio e o índio.

Destacamos que, no que se refere aos processos de cálculo, esses ficaram muito mais fáceis e práticos devido aos avanços tecnológicos a evolução dos computadores. Códigos computacionais vem sendo desenvolvidos, com o intuito de auxiliar/melhorar cálculos de blindagem, utilizando como modelo matemático, a equação de transporte de Boltzmann já descrita no capitulo 2 ou a equação da difusão.

Além dos avanços tecnológicos que auxiliaram/possibilitaram melhores condições para realizar cálculos relacionados a transporte de nêutrons, materiais direcionados a proteção radiológica da instalação também evoluíram.

Atualmente, no que se refere a proteção radiológica, a Comissão Nacional de Engenharia Nuclear (CNEN), possui um documento chamado "Diretrizes Básicas de Radioproteção", no qual esse documento descreve três fatores que devem ser levados em consideração CNEN (2005), relacionados a doses devidas e exposição de radiações ionizantes, a saber:

- Tempo de exposição: as doses devidas às radiações ionizantes são diretamente proporcionais ao tempo que um indivíduo fica exposto a uma fonte de radiação. Com base nesse fato, atividades que envolvem fontes de radiação, devem ter como base um planejamento voltado para minimizar o máximo possível o tempo de sua execução. Distância: a dose recebida por exposição a fontes de radiação é inversamente proporcional ao quadrado da distância entre a fonte e o indivíduo exposto. Ou seja, se a distância entre a fonte e a pessoa exposta for duplicada, a dose recebida será quatro vezes menor, e se a distância for triplicada, a dose será nove vezes menor.

 Blindagem: uma vez que se utiliza material radioativo, a blindagem faz parte do projeto da instalação pois ela auxilia na segurança tanto da instalação quanto na segurança dos humanos envolvidos no manuseio desses materiais.

Na área de saúde, as radiações ionizantes são utilizadas para fins terapêuticos e diagnósticos. Em hospitais, riscos da radiação ionizante se encontram nas áreas de radiodiagnóstico e radioterapia, como centros cirúrgicos e Unidades de Terapia Intensiva (UTI). Nessa perspectiva, pessoas que trabalham diretamente com fontes ou geradores de radiação ionizantes devem ter materiais que forneçam segurança contra exposições acidentais e/ou desnecessárias. Materiais individuais como óculos, luvas, aventais, bem como, sistemas de contenção, sinalização devem estarem disponíveis para o sucesso das atividades. Além disso, de acordo com o Ministério do Trabalho e Emprego (MTE, 2005), no ambiente laboratorial também devem ser seguidas as normas de segurança para a manipulação e descarte de materiais radioativos além do uso de equipamentos de radioproteção, dosímetros para avaliação periódica e sinalização da área de risco.

4.3 Uso dos nêutrons em procedimentos terápicos

De acordo com Perez e Bradle (1997), no Brasil, doenças infecciosas e outras doenças reduzem a expectativa de vida e a taxa de mortalidade relacionada ao câncer atinge a marca de 20%. Nos Estados Unidos, 1500 vidas são ceifadas diariamente decorrente do câncer. Preservação da qualidade de vida bem como sobrevida são questões imprescindíveis quando há necessidade em se optar por uma terapia. Todavia, em alguns casos não se obtêm a cura e em outros existe a recorrência (MAUCH; LOEFFLER, 1993).

Segundo Campos (2000), todo tratamento de câncer visa atingir célular cancerosas, que têm o mesmo fenótipo das células do paciente e preservar as células normais. Dessa maneira, a seletividade da droga química ou do processo de irradiação é diretamente proporcional ao sucesso do tratamento, subentendido pelo controle local do tumor.

Para Specht et al. (2015), a radioterapia é um dos três pilares essenciais do tratamento do câncer. Hoje, o tratamento de fótons administrado por aceleradores lineares é a modalidade de tratamento mais comumente utilizada. Existe, no entanto, uma forte razão física e biológica para o uso da terapia de partículas em radiação oncológica. Devido à elevada eficácia biológica relativa (RBE), a terapia com feixe de nêutrons pode oferecer uma vantagem em comparação com a terapia com feixes de fótons, especialmente no tratamento de neoplasias conhecidas por serem radiorresistentes. Isto é resultado da alta transferência de energia linear (LET), que está na faixa de cerca de 200 keV / μ_m para feixes de nêutrons de 2 MeV, cerca de 200 vezes maior do que com feixes de fótons convencionais. A RBE para um feixe de nêutron de 2 MeV é estimada entre 2 e 7. Isto significa que 1 Gy entregue pela terapia de nêutrons rápidos (FNT) deve ser tão eficaz em matar células cancerosas como 2-7 Gy de tratamento de fótons. Os números aqui indicados implicam grandes incertezas com o RBE variando entre diferentes entidades tumorais e mesmo dentro das entidades dependendo da classificação do tumor.

Especialmente para tumores cerebrais e tecidos de reação tardia, o RBE é estimado para estar na parte superior da gama. A terapia de nêutrons pode ser capaz de superar o efeito negativo da hipóxia tumoral, uma vez que a relação de aumento de oxigênio de nêutrons é apenas cerca de 1,3 em comparação com até 3 em fótons. Além disso, existe apenas uma fraca dependência do ciclo celular, o que significa que as células não proliferantes também podem ser eficazmente direcionadas para a terapia com nêutrons (SPECHT et al., 2015).

Nêutrons não necessitam de oxigênio para ajudar a matar as células cancerosas, uma vez que eles são muitas vezes utilizados em grandes tumores cancerígenos que não responderam a outras formas de tratamento de radioterapia e pode matar mais células cancerosas mais rápido do que a terapia tradicional, usando menos radiação. Para cânceres que se espalharam para outras partes do corpo, no entanto, ainda pode ser obrigado a quimioterapia em áreas fora do tumor principal.

Alguns tipos de terapia que utilizam nêutrons são conhecidas como braquiterapia e terapia por captura de nêutrons pelo boro.

Uma técnica ainda considerada experimental mas que aparece como um tratamento promissor no combate ao câncer é a terapia por captura de nêutrons pelo boro (BNCT – do inglês boron neutron capture therapy). Esta técnica consiste da administração intravenosa de um composto borado no paciente, seguida de irradiação por um feixe de nêutrons epitérmicos. O boro contido no composto captura nêutrons em reações $10B(\eta, \alpha)$ ⁷Li, produzindo partículas com alta transferência linear de energia e alcance médio em torno de 10 μ m (aproximadamente o diâmetro da célula). Dessa maneira, a deposição de dose proveniente da reação nuclear com o boro é mantida no tumor. Além disso, como o metabolismo das células cancerosas é mais alto que o das células normais, o tumor absorve uma maior concentração do composto borado do que o tecido normal adjacente, promovendo uma irradiação seletiva (CAMPOS, 2000).

A braquiterapia vem sendo utilizada no tratamento dos tumores cerebrais primários, principalmente em casos de recidiva. Nos últimos anos foi desenvolvida uma modalidade de braquiterapia que consiste de um dispositivo composto por um balão e um cateter para infusão de líquido radioativo. tos.A braquiterapia com agulha de califórnio (Cf) pode ser empregada como fonte de nêutrons para BNCT. O ²52Cf é um isótopo que sofre fissão espontânea, emitindo nêutrons rápidos com uma energia média de 2,1 MeV, seguidos de radiação gama. Sua meia-vida é de 2,7 anos e é considerado satisfatório para o uso em braquiterapia de tumores cerebrais (CAMPOS; BRANDãO, 2013).

Por fim, é importante destacar que ambas as técnicas foram utilizadas para o glioblastoma multiforme (GBM). Esse é um tumor primário maligno, comum entre os tumores do sistema nervoso central, e um dos tipos de câncer mais letais, devido à sua agressividade e à ineficácia dos tratamentos, além disso, algumas dessas técnicas com suas peculiaridades também estão sendo realizadas em tumores relacionados a próstata (CAMPOS, 2000).

No próximo capitulo, iremos apresentar os resultados numéricos de problemas relacionados a blindagem de fonte de nêutrons somente, uma vez que, não possuímos dados relativos a técnica do "well logging". No entanto, resolvemos discorrer sobre essa técnica nesse capitulo pois é uma aplicação da partícula neutrônica, já que, utiliza fonte de nêutrons nas sondas para a identificação de hidrocarbonetos e posteriormente aliada a outras técnicas permite identificar a existência de petróleo na região de interesse.

5 Resultados e Discussão

No presente capitulo modelamos e apresentamos os resultados para seis problemas modelos estudados. Descrevemos por meio de tabelas comparativas e gráficos, os resultados numéricos obtidos a partir de simulações numéricas, utilizando os Métodos Diamond Difference, Step e Step Characteristic.

Na seção 5.1, apresentamos experimentos numéricos para um problema modelo homogêneo, onde o domínio possui 20 cm e condição de contorno prescrita, $\Psi_m(0) =$ 0 para $\mu > 0$ e $\Psi_m(20) = 1$ para $\mu > 0$ e fonte externa nula. Nessa mesma seção, justificamos a escolha pelo método Step Characteristic para realizarmos a simulação.

Na seção 5.2, apresentamos os resultados numéricos para um problema homogêneo, com grade espacial de espessura de 21 cm e condição de contorno prescrita, $\Psi(0) = 10$ para $\mu > 0$ e $\Psi(21) = 0$ para $\mu > 0$ e fonte externa nula. Essa seção tem como objetivo avaliar se existe a influência da ordem da quadratura de Gauss - Legendre no cálculo da obtenção do fluxo escalar neutrônico. Para realizamos essa análise, diferenciamos os parâmetros materiais, escolhemos o método numérico Diamond Difference e variamos a ordem da quadratura.

Na seção 5.3, buscamos identificar qual método possui o melhor desempenho para o cálculo do fluxo escalar de nêutrons. Para isso, realizamos a simulação com o mesmo problema estudado na seção 5.2 com o intuito de identificar quais são os menores desvios relativos percentuais apresentados pelos métodos, bem como, o comportamento dos mesmos variando a espessura das malhas.

Na seção 5.4, apresentamos os resultados numéricos para um problema modelo heterogêneo, com condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 10$, para $\mu > 0$ e $\Psi_m(21) = 0$ para $\mu < 0$. O domínio possui 21 cm, dividida em três regiões espaçadas identicamente em 7 cm e os parâmetros materiais estão dispostos na tabela 2. O objetivo dessa seção é diagnosticar qual é a melhor combinação de materiais para realizarmos uma blindagem e se todas as combinações são adequadas para a realização da blindagem, com base no escape de nêutrons que em todos os problemas será de 1E-05. Esses também são os objetivos da seção 5.5, que possui o mesmo problema heterogêneo descrito nesse parágrafo, diferindo somente no comprimento do domínio de 9 cm, igualmente espaçados em três regiões de três centímetros, fazendo com que a condição de contorno seja $\Psi_m(0) = 10$, para $\mu > 0$ e $\Psi_m(9) = 0$ para $\mu < 0$. Realizamos essa diminuição do domínio, com o intuito de investigarmos se a blindagem de 21 cm não seria uma blindagem muito espessa.

Por fim, na seção 5.6, apresentamos um problema modelo heterogêneo com

condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 10$, para $\mu > 0$ e $\Psi_m(9) = 0$ para $\mu < 0$, com grade espacial de 9 cm, divididas em três regiões diferentemente espaçadas. Este problema foi criado com o intuito de utilizar uma fina camada de Boro na blindagem, tendo em vista que a seção de choque para absorção de nêutrons desse material é muito alta.

Realizamos simulações para os seis problemas modelos abordados nesse capitulo, considerando a fonte externa nula em todos eles em meios não multiplicativos. Além disso, para a realização das simulações desses problemas, ressaltamos que como se trata de uma pesquisa teórica, escolhemos alguns materiais em função de suas características físicas e não levamos em consideração características como viabilidade térmica e custo.

Todas as simulações dos códigos computacionais desenvolvidos em Linguagem C foram realizadas em um computador pessoal, com processador *Intel* (*R*) *Core* (*TM*) *i5-4210U CPU* @ *1.70GHz* e *4 Gb de Memória RAM* e o tempo de duração para cada simulação não ultrapassou um segundo.

5.1 Validação

Para validar os métodos numéricos implementados para a solução numérica da equação de transporte em ordenadas discretas, utilizando o método Step Characteristic, vamos simular o problema homogêneo descrito Oliveira (2007) e compararmos nossos resultados com os resultados apresentados nesse trabalho.

O problema descrito em Oliveira (2007) é homogêneo, sem fonte externa, com condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 0$, para $\mu_m > 0$ e $\Psi_m(20) = 1$ para $\mu_m < 0$, ilustrado na Figura 10:



Figura 10 – Problema de validação Fonte: Adaptado de: (OLIVEIRA, 2007)

Região	σ_t	σ_{s0}	S(x)
1	1.0	0.97	0.0

Tabela 4 – Propriedades físico do material

Antes de realizarmos as discussões dos resultados, devemos calcular o livre caminho médio do nêutron com base nas propriedades materiais apresentadas na Tabela 4 para o Material 1. Assim, para o material, disposto na Tabela 4, o livre caminho médio do nêutron considerando o Material 1, corresponde a 1.00 cm. Dessa forma, a Tabela 5, classifica as células espaciais de acordo com o caminho médio percorrido para esse problema.

Tabela 5 – Classificação das células espaciais da grade espacial para o problema de validação

Tipo	Comprimento (cm)
Fina	<1
Média	=1
Grossa	>1

Escolhemos realizar o experimento utilizando o Método Step Characteristic mas poderia ter sido utilizado os outros dois métodos, uma vez que de acordo com Lewis e Miller (1984), os métodos apresentam bons resultados em malhas finas. Para esse experimento foi considerado h = 0.01 cm e Oliveira (2007) utiliza h = 5 cm. Listamos na Tabela 6, os resultados obtidos na nossa simulação e os resultados reportados em Oliveira (2007).

Tabela 6 – Comparação entre os fluxos escalares de nêutrons utilizando a quadratura de Gauss-Legendre de ordem 128

v	Método SGF Método Step Characteristic		Desvio Relativo	
X	Fluxo escalar	Fluxo escalar	Percentual (%)	
0	6.165049E-04	6.165817E-04	1.245732E-02	
5	9.1499825E-03	9.150398E-03	4.540992E-03	
10	4.159384E-02	4.159505E-02	2.909084E-03	
15	1.833896E-01	1.833909E-01	7.088733E-04	
20	8.523655E-01	8.523557E-01	1.149741E-03	

Os resultados dispostos na Tabela 6, mostram que os fluxos escalares obtidos em nossa simulação, são bem próximos dos descritos em Oliveira (2007). Observando ainda, os desvios relativos percentuais calculados, percebemos que eles são baixos.

Sendo assim, os resultados obtidos em nossa simulação foram satisfatórios e podemos então, prosseguir com as demais simulações. Nas seções que seguem apresentaremos os resultados numéricos dos problemas estudados, bem como discussões a respeito dos mesmos.

5.2 Análise das quadraturas de *Gauss-Legendre*

5.2.1 Problema modelo A

O problema é homogêneo, com condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 10$ para $\mu_m > 0$ e $\Psi_m(21) = 0$ para $\mu_m < 0$. A grade possui 21 cm, dividida em três regiões de 7 cm conforme ilustrado na Figura 11.



Figura 11 – Problema modelo A Fonte: Criado pelo próprio autor

Para realizar essas simulações escolhemos três materiais dentre os seis materiais listados na Tabela 2 e foram escolhidos de maneira que fosse realizadas três simulações,para cada tipo de material, a saber, material espalhador (Ferro), neutro (Vanádio) e absorvedor (Manganês).

O método utilizado para a realização das simulações foi Método Diamond Difference porém destacamos que poderia ter sido qualquer outro método dentre os implementados nessa pesquisa, tendo em vista que, todos esses métodos possuem uma boa aproximação para malhas finas, de acordo com (LEWIS; MILLER, 1984). Vale a pena ressaltar que o foco dessa seção está em identificar se há influencia da ordem da quadratura para a obtenção do fluxo escalar e não na classificação entre qual método possui a melhor aproximação.

Dessa forma, antes de realizarmos as discussões sobre os resultados obtidos nas simulações faz-se necessário classificarmos as células em grossas, médias e finas. Para isso, utilizamos como critério o livre caminho médio do nêutron para cada material utilizado nessa seção. Os valores referentes ao livre caminho médio do nêutron para

:

esses materiais, já se encontram calculados na tabela 3 do capítulo. Nas Tabelas 7, 8 e 9, constam as classificações das células espaciais para cada material utilizado.

Tipo	h = Comprimento (cm)
Fina	<0.9
Média	= 0.9
Grossa	>0.9

Tabela 7 – Classificação das células espaciais - material: Ferro

Tabela 8 - Classificação das células espaciais - material: Manganês

Tipo	h = Comprimento (cm)
Fina	<0.8
Média	= 0.8
Grossa	>0.8

Tabela 9 - Classificação das células espaciais - material: Vanádio

Tipo	h = Comprimento (cm)
Fina	<1.40
Média	= 1.40
Grossa	>1.40

Os parâmetros materiais utilizados nessa simulação estão dispostos na tabela 10

1abela 10 - 1 alallellos illatellais - l'ello

Material	σ_t	σ_s
Ferro	1.1415	0.9251

Abaixo seguem as tabelas 11, 12, 13 e 14 que representam os resultados obtidos para o fluxo escalar neutrônico, desvio relativo percentual e número de iterações dessa simulação.

		Pontos do domínio			
		x = 0	x = 7	x = 14	x = 21
Malha 21000 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	1.689897E-02	4.078027E-05	6.013722E-08
(h = 0.001 cm)	Iterações		12	22	
Malha 2100 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	1.682577E-02	4.063709E-05	5.954141E-08
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	4.331625E-01	3.511012E-01	9.907508E-01
(II - 0.01 CIII)	Iterações		12	22	
Malha 200 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	1.679573E-02	4.049210E-05	5.922303E-08
(h = 0.07 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	6.109248E-01	7.066407E-01	1.520173E+00
(II = 0.07 CIII)	Iterações	122			
Malha 210 nodos (h = 0.1 cm)	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	1.676383E-02	4.033844E-05	5.888623E-08
	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	7.996937E-01	1.083441E+00	2.080226E+00
(II - 0.1 CIII)	Iterações		12	22	
Malha 21 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	1.105679E-02	1.754816E-05	1.689591E-08
(h = 1.0 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	3.457122E+01	5.696900E+01	7.190440E+01
(11 - 1.0 CIII)	Iterações	128			
Malha 2 nodos	Fluxo Escalar	6.940140E+00	-3.415999E+00	1.583362E+00	-5.347617E-01
(h - 70 cm)	Desvio Relativo (%)	3.810706E-01	2.031424E+04	3.882567E+06	8.892359E+08
(11 - 7.0 CIII)	Iterações		5	8	

Tabela 11 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond Difference - Quadratura S₂

		Pontos do domínio			
		x = 0	x = 7	x = 14	x = 21
Malha 21000 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.155098E-02	8.260919E-05	1.864602E-07
(h = 0.001 cm)	Iterações		11	6	
Malha 2100 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.146489E-02	8.234222E-05	1.843754E-07
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	3.994714E-01	3.231723E-01	1.118094E+00
(II - 0.01 CIII)	Iterações		11	6	
Malha 200 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.143472E-02	8.211096E-05	1.835992E-07
(h = 0.07 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	5.394650E-01	6.031169E-01	1.534376E+00
	Iterações	116			
Malha 210 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ²)	6.966688E+00	2.140269E-02	8.186573E-05	1.827773E-07
(h = 0.1 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	6.880894E-01	8.999725E-01	1.975167E+00
(11 - 0.1 Cm)	Iterações		11	16 8.186573E-05 8.999725E-01 16	
Malha 21 nodos $(h - 1.0 \text{ cm})$	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	1.552260E-02	4.306301E-05	6.973074E-08
	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	2.797265E+01	4.787141E+01	6.260288E+01
(11 - 1.0 CIII)	Iterações	121			
Malba 3 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.902147E+00	-3.589276E+00	1.863609E+00	-8.352620E-01
(h - 7.0 cm)	Desvio Relativo(%)	9.264230E-01	1.675482E+04	2.255834E+06	4.479574E+08
$(\Pi = 7.0 \text{ Cm})$	Iterações		5	8	

Tabela 12 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond Difference - Quadratura S₄

		Pontos do domínio						
		x = 0	x = 7	x = 14	x = 21			
Malha 21000 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+000	2.138283E-002	8.265037E-005	1.875126E-007			
(h = 0.001 cm)	Iterações		116					
Malha 2100 podos	Fluxo Escalar (n/cm ²)	6.966688E+00	2.129749E-02	8.238374E-05	1.851228E-07			
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	3.991053E-01	3.225999E-01	1.274474E+00			
(II = 0.01 cm)	Iterações		116					
Malha 300 nodos $(h = 0.07 \text{ cm})$	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.126757E-02	8.215354E-05	1.843475E-07			
	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	5.390306E-01	6.011225E-01	1.687940E+00			
(II - 0.07 CIII)	Iterações	116						
Malha 210 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+000	2.123580E-002	8.190943E-005	1.835266E-007			
(h - 0.1 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	6.876078E-01	8.964751E-01	2.125724E+00			
(II - 0.1 CIII)	Iterações	116						
Malha 21 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	1.252805E-02	5.436615E-05	3.566502E-08			
(h - 1.0 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	4.141070E+01	3.422153E+01	8.097993E+01			
(11 – 1.0 (111)	Iterações		12	24				
Malha 3 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.883531E+00	-3.622950E+00	1.939199E+00	-9.489158E-01			
(h = 7.0 cm)	Desvio Relativo (%)	1.193637E+00	1.704327E+04	2.346168E+06	5.060545E+08			
	Iterações	58						

Tabela 13 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond Difference - Quadratura S₈

		Pontos do domínio				
		x = 0	x = 7	x = 14	x = 21	
Malha 21000 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.135249E-02	8.253387E-05	1.872704E-07	
(h = 0.001 cm)	Iterações		11	6		
Malha 2100 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.126727E-02	8.226761E-05	1.846008E-07	
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	3.991104E-01	3.226069E-01	8.666600E-03	
(II = 0.01 CIII)	Iterações		11	6		
Malha 200 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.123739E-02	8.203774E-05	1.838277E-07	
(h = 0.07 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	5.390472E-01	6.011229E-01	4.274259E-01	
(II - 0.07 CIII)	Iterações	116				
Malha 210 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.120566E-02	8.179397E-05	1.830091E-07	
(h = 0.1 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	6.876481E-01	8.964804E-01	8.708308E-01	
(11 – 0.1 CIII)	Iterações	116				
Malha 21 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	-1.520185E-02	2.418766E-03	-1.622533E-04	
(h = 1.0 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	1.711947E+02	2.830634E+03	8.798653E+04	
(11 – 1.0 CIII)	Iterações		8	5		
Malha 3 nodos (h = 7.0 cm)	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.877619E+00	-3.631066E+00	1.959582E+00	-9.823347E-01	
	Desvio Relativo (%)	1.278498E+00	1.710535E+04	2.374176E+06	5.320940E+08	
	Iterações	58				

Tabela 14 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond Difference - Quadratura S₁₆

Tabela 15 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, o desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond Difference - Quadratura S₃₂

		Pontos do domínio					
		x = 0	x = 7	x = 14	x = 21		
Malha 21000 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.134510E-02	8.250531E-05	1.874113E-07		
(h = 0.001 cm)	Iterações		1	16			
Malha 2100 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.125990E-02	8.223914E-05	1.844731E-07		
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	0.0000000E+00	3.991548E-01	3.226095E-01	1.567781E+00		
(n = 0.01 cm)	Iterações		116				
Malha 200 madaa	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.123003E-02	8.200934E-05	1.837005E-07		
(h = 0.07 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	5.390933E-01	6.011371E-01	1.9800300E+00		
(11 - 0.07 cm)	Iterações	116					
Malha 210 podos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.119832E-02	8.176566E-05	1.828825E-07		
(h = 0.1 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	6.876520E-01	8.964878E-01	2.416503E+00		
$(\Pi = 0.1 \text{ CHI})$	Iterações	116					
Malha 21 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966686E+00	-4.776066E-02	1.717219E-02	-4.582931E-03		
(h = 1.0 cm)	Desvio Relativo (%)	2.870805E-05	3.237547E+02	-2.071344E+04	2.445487E+06		
(11 – 1.0 (111)	Iterações	81					
Malha 2 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.875991E+00	-3.633140E+00	1.964960E+00	-9.823347E-01		
(h = 7.0 cm)	Desvio Relativo (%)	1.301867E+00	1.712096E+04	-2.381516E+06	5.289692E+08		
	Iterações	58					

Observando os dados apresentados nas Tabelas 11 a 15 percebe-se que, aumentando a ordem da quadratura, conforme o esperado, a diferença entre os valores do fluxo escalar neutrônico de altas quadraturas é menor, ou seja, a diferença entre eles tendem a zero. A seguir apresentamos a Tabela 16 que realiza uma comparação entre os resultados obtidos para o fluxo escalar utilizando o Método Diamond Difference com h = 0.001 cm, apresentando os desvios relativos percentuais. Calculamos os desvios relativos percentuais da seguinte maneira de S₄ para S₂, de S₈ para S₄ e assim sucessivamente.

Ordom	Fluxo escalar	
da	em x = 21 cm	Desvio
	Material:	Relativo (%)
quatiatula	Ferro	
2	6.013722E-08	
4	1.864602E-07	2.100579E+00
8	1.875126E-07	5.644100E-03
16	1.872704E-07	1.291647E-03
32	1.874113E-07	7.523880E-04

Tabela 16 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico e os desvios relativos percentuais das diferentes quadraturas para o material Ferro

Perceba que, a partir de S_{16} , o aumento da ordem da quadratura não tem melhor resultado pois o desvio relativo percentual dos fluxos escalares apresentados entre a quadratura de ordem trinta e dois e dezesseis é menor que 0.1% porém o custo computacional aumenta consideravelmente uma vez que, neste caso, temos mais dezesseis ordenadas discretas.

Assim, com o intuito de continuarmos nossa investigação a respeito da influência da quadratura na obtenção do fluxo escalar neutrônico, realizamos simulações com as mesmas características do problema da seção 5.2, agora, utilizando o material neutro Vanádio e absorvedor Manganês cujas propriedades materiais constam na Tabela 17:

Material	σ_t	σ_s
Vanádio	0.7191	0.3556
Manganês	1.2540	0.1710

Tabela 17 – Parâmetros materiais

A seguir apresentamos a Tabela 18, com os fluxos escalares obtidos em x = 21 cm, considerando h = 0.001 cm e seus respectivos erros comparados entre as quadraturas.

Ordem da quadratura	Fluxo escalar em x = 21 cm Material: Vanádio	Desvio Relativo (%)	Fluxo escalar em x = 21 cm Material: Manganês	Desvio Relativo (%)
2	4.074949E-02		1.9688800E-18	
4	8.274044E-07	9.999797E-01	2.3215130E-13	1.179093E+05
8	9.552710E-07	1.545394E-01	1.0872840E-12	3.683515E+00
16	9.5311890E-07	2.252869E-03	1.1096170E-12	2.054017E-02
32	9.5258220E-07	5.630987E-04	1.1097270E-12	9.913330E-05

Tabela 18 -	 Distribuição do fluxo escalar neutrônico e os desvios relativos percentuais
	das diferentes quadraturas para os materiais Vanádio e Manganês

De modo geral, percebemos nas nossas simulações que com a ordem da quadratura, os valores dos fluxos escalares neutrônicos tendem a convergir. Notamos também, que no caso do material Manganês (ABS), a ordem da quadratura tem maior impacto, tendo uma diferença nos valores dos desvios relativos percentuais de S_{32} para S_{16} menor que 0.01%, como podemos notar na Tabela 18. Sendo assim, utilizaremos nas próximas simulações a quadratura de ordem dezesseis.

5.3 Análise dos métodos Diamond Difference, Step e Step Characteristic

Visamos nessa seção identificar qual método dentre os três estudados obtém a melhor aproximação para o fluxo neutrônico escalar. Para isso, escolhemos a quadratura S_{16} , já que para os materiais simulados anteriormente na seção 5.2 os resultados apresentaram mais estáveis para essa quadratura. Escolhemos o material Ferro, para realizarmos essa análise, no entanto poderia ter sido qualquer outro material.

5.3.1 Problema modelo B

As características do problema B são as mesmas do problema A. Ou seja, é um problema homogêneo, com condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 10$ para $\mu_m > 0$ e $\Psi_m(21) = 0$ para $\mu_m < 0$. A grade possui 21 cm, dividida em três regiões de 7, cm idem Figura **??** e o material utilizado foi o Ferro.

Dessa maneira, consideramos como solução referência a encontrada utilizando o método Diamond Difference com células de h = 0.001 cm. A seguir, seguem as Tabelas 19, 20 e 21 que apresentam os resultados para o fluxo escalar bem como os desvios relativos e número de iterações obtidos nessa simulação. Note que a Tabela 19 é idêntica

a Tabela 14 contudo, optamos por repetir para facilitar a compreensão. Compararemos os resultados do fluxo escalar neutrônico com h = 0.01 cm, 0.07 cm, 0.1 cm, 1 cm e 7 cm, com o objetivo de verificar como se comportam os métodos com malhas finas, médias e grossas.

		Pontos do dominio			
		x = 0	x = 7	x = 14	x = 21
Sol. Ref Malha 21000 nodos DD	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.135249E-02	8.253387E-05	1.872704E-07
(h = 0.001 cm)	Iterações		11	6	
Malha 2100 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.126727E-02	8.226761E-05	1.846008E-07
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	3.991104E-01	3.226069E-01	8.666600E-03
$(\Pi = 0.01 \text{ cm})$	Iterações		11	6	
Malha 300 nodos (h = 0.07 cm)	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.123739E-02	8.203774E-05	1.838277E-07
	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	5.390472E-01	6.011229E-01	4.274259E-01
(n = 0.07 cm)	Iterações	116			
Malha 210 podos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.120566E-02	8.179397E-05	1.830091E-07
(h = 0.1 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	6.876481E-01	8.964804E-01	8.708308E-01
$(\Pi = 0.1 \text{ cm})$	Iterações	116			
Malha 21 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	-1.520185E-02	2.418766E-03	-1.622533E-04
(h = 1.0 cm)	Desvio Relativo (%)	0.000000E+00	1.711947E+02	2.830634E+03	8.798653E+04
(n = 1.0 cm)	Iterações		8	5	
Malha 2 radas	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.877619E+00	-3.631066E+00	1.959582E+00	-9.823347E-01
(h - 7.0 cm)	Desvio Relativo (%)	1.278498E+00	1.710535E+04	2.374176E+06	5.320940E+08
(n = 7.0 cm)	Iterações		5	8	

Tabela 19 – Distribuição do fluxo neutrônico, desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Diamond Difference - Quadratura S₁₆

Tabela 20 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Step -Quadratura S₁₆

		Pontos do dominio			
		x=0	x=7	x = 14	x = 21
Sol. Ref Malha 21000 nodos DD	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.135249E-02	8.253387E-05	1.846168E-07
(h = 0.001 cm)	Iterações		11	16	
Malba 2100 padas	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.955337E+00	2.184030E-02	8.681301E-05	2.009110E-07
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	1.629325E-01	2.284558E+00	5.184708E+00	8.825957E+00
(n = 0.01 cm)	Iterações		11	16	
Malha 300 nodos $(h = 0.07 \text{ cm})$	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.891707E+00	2.542327E-02	1.180575E-04	3.258888E-07
	Desvio Relativo (%)	1.076279E+00	1.906466E+01	4.304128E+01	7.652175E+01
(n = 0.07 cm)	Iterações	116			
Malha 210 podos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.862286E+00	2.730820E-02	1.364543E-04	4.092327E-07
(h = 0.1 cm)	Desvio Relativo (%)	1.498589E+00	2.789234E+01	6.533128E+01	1.216660E+02
$(\Pi = 0.1 \text{ Cm})$	Iterações	116			
Malha 21 padas	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.313710E+00	1.064363E-01	2.159312E-03	3.131201E-05
(h = 1 cm)	Desvio Relativo (%)	9.372861E+00	3.984725E+02	2.516274E+03	1.686054E+04
$(\Pi = 1 \text{ cm})$	Iterações	113			
Malla 2 no das	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	5.479909E+00	8.461613E-01	1.426512E-01	2.201939E-02
(h = 7 cm)	Desvio Relativo (%)	2.134126E+01	3.862823E+03	1.727396E+05	1.192698E+07
(n = 7 cm)	Iterações	80			

Tabela 21 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico, desvio relativo percentual e número de iterações obtidos utilizando o Método Step Characteristic - Quadratura S₁₆

		Pontos do dominio			
		x=0	x=7	x = 14	x = 21
Sol. Ref Malha 21000 nodos DD	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966688E+00	2.135249E-02	8.253387E-05	1.846168E-07
(h = 0.001 cm)	Iterações		1	16	
Malha 2100 madaa	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.966589E+00	2.126914E-02	8.228148E-05	1.846524E-07
(h = 0.01 cm)	Desvio Relativo (%)	1.421048E-03	3.903526E-01	3.058017E-01	1.928319E-02
(n = 0.01 cm)	Iterações		11	16	
Malha 300 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.961943E+00	2.132911E-02	8.271694E-05	1.863544E-07
	Desvio Relativo (%)	6.810984E-02	1.094954E-01	2.218120E-01	9.411928E-01
(n = 0.07 cm)	Iterações	116			
Malha 210 nodos	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.957207E+00	2.139266E-02	8.317969E-05	1.881629E-07
(h = 0.1 cm)	Desvio Relativo (%)	1.360905E-01	1.881279E-01	7.824909E-01	1.920789E+00
$(\Pi = 0.1 \text{ cm})$	Iterações	116			
Malha 21 padas	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	6.606376E+00	3.357401E-02	1.961946E-04	7.537871E-07
(h = 1 cm)	Desvio Relativo (%)	5.171927E+00	5.723698E+01	1.377140E+02	3.082982E+02
(n = 1 cm)	Iterações	113			
Malha 2 na das	Fluxo Escalar (n/cm ² s)	5.534890E+00	5.923063E-01	6.332222E-02	6.060048E-03
(h = 7 cm)	Desvio Relativo (%)	2.055206E+01	2.673945E+03	7.662271E+04	3.282401E+06
(n = 7 cm)	Iterações	80			
Através da análise dos dados dispostos nas Tabelas 19, 20 e 21, percebemos de maneira geral que o Método Step Characteristic gera resultados numéricos mais precisos para o fluxo de nêutrons em todos os pontos do domínio, considerando malhas finas pois se compararmos os resultados apresentados pelo fluxo escalar de nêutrons em todos os pontos destacados nessas Tabelas, percebemos que, ao compararmos os valores obtidos, os desvios relativos percentuais calculados utilizando esse método são os menores. Em malhas grossas, todos os métodos possuem um desempenho indesejável em que a ordem do desvio relativo em relação a nossa solução referência, em alguns casos, fica entre 1E+06% e 1E+08 %. Esses resultados obtidos estão em conformidade com a literatura pesquisada em (LEWIS; MILLER, 1984).

Dessa maneira, identificamos através da análise de quadratura que para nossas simulações, a quadratura de ordem dezesseis se mostrou mais adequada pois obteve valores mais estáveis. Quanto aos métodos estudados, o Step Characteristic se mostrou mais eficiente apresentando o menor desvio relativo percentual comparado aos demais. Sendo assim, para os próximos problemas, utilizaremos somente o método Step Characteristic, a quadratura de ordem dezesseis e células espaciais de 0.01 cm.

5.4 Problema modelo C

Esse problema é heterogêneo, com condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 10$ para $\mu_m > 0$ e $\Psi_m(21) = 0$ para $\mu_m < 0$. A grade possui 21 cm, dividida em três regiões de 7 cm conforme ilustrado na figura 12. Realizamos as simulações utilizando o Método Step Caracteristics e o h considerado foi de 0.01 cm. Vale lembrar que na seção 3, calculamos o livre caminho médio do nêutron para todos os materiais utilizados nessa simulação, podendo ser verificados novamente na Tabela 3 dessa seção.



Figura 12 – Problema modelo C Fonte: Criado pelo próprio autor

Para realizarmos a composição da grade desse problema, realizamos combinações utilizando materiais, de maneira que, fique um material de cada tipo em cada região da grade. Por exemplo, escolhemos para realizar nossa primeira simulação os materiais Ferro (ESP), Manganês (ABS) e Vanádio (NE). Assim, compomos nossa grade:

- 1) NE (região 1) ESP (região 2) ABS (região 3)
- 2) NE (região 1) ABS (região 2) ESP (região 3)
- 3) ESP (região 1) NE (região 2) ABS (região 3)
- 4) ESP (região 1) ABS (região 2) NE (região 3)
- 5) ABS (região 1) NE (região 2) ESP (região 3)
- 6) ABS (região 1) ESP (região 2) NE (região 3)

Ou seja, os materiais foram dispostos em todas as combinações possíveis nessa grade e não se repetiram. Realizamos outra simulação utilizando os materiais Ferro (ESP), Manganês (ABS) e Platina (NE) e compomos nossa grade dessa forma:

- 1) NE (região 1) ESP (região 2) ABS (região 3)
- 2) NE (região 1) ABS (região 2) ESP (região 3)
- 3) ESP (região 1) NE (região 2) ABS (região 3)
- 4) ESP (região 1) ABS (região 2) NE (região 3)
- 5) ABS (região 1) NE (região 2) ESP (região 3)
- 6) ABS (região 1) ESP (região 2) NE (região 3)

Por fim, continuando com nosso composição de grades nossa próxima simulação considerou os materiais Níquel (ESP), Manganês (ABS) e Vanádio (NE) e compomos nossa grade dessa forma:

1)NE (região 1) - ESP (região 2) - ABS (região 3)
 2)NE (região 1) - ABS (região 2) - ESP (região 3)
 3)ESP (região 1) - NE (região 2) - ABS (região 3)
 4)ESP (região 1) - ABS (região 2) - NE (região 3)
 5)ABS (região 1) - NE (região 2) - ESP (região 3)
 6)ABS (região 1) - ESP (região 2) - NE (região 3)

Os resultados dessas simulações encontram se dispostos nas Tabelas 22, 23 e 24. Apresentamos nessas Tabelas o fluxo escalar neutrônico no ponto da grade x = 21cm pois estamos interessados na blindagem nessa região, além disso classificamos de 1 a 6, onde 1 é a sequência que oferece a melhor combinação e 6 a pior combinação para ser realizado a blindagem. Consideramos como critério para uma blindagem segura, fluxos escalares neutrônicos abaixo com a ordem de grandeza de igual ou menor que 1E-05. Os parâmetros materiais de todos os materiais utilizados estão na Tabela 2.

Tabela 22 -	- Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro, Man-
	ganês e Vanádio - 21 cm

Método Step Characteristic - Quadratura S ₁₆					
Materiais	Materiais: Ferro (ESP) - Manganês (ABS) - Vanádio (NE) - 21 cm				
Combinação	Fluxo escalar obtido em $x = 21$ cm				
Combinação	h = 0.01 cm	Ordeni de Classificação			
NE - ESP - ABS	2.874799E-09	1			
NE - ABS - ESP	5.787894E-09	6			
ESP - NE - ABS	3.823624E-09	3			
ESP - ABS - NE	4.860740E-09	4			
ABS - NE - ESP	5.378904E-09	5			
ABS - ESP - NE	3.460098E-09	2			

Tabela 23 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Manganês, Níquel e Vanádio

Método Step Characteristic - Quadratura S ₁₆				
Materiais: Manganês (ABS) - Níquel (ESP) - Vanádio (NE) - 21 cm				
Fluxo escalar obtido em x = 21 cm				
Combinação	h = 0.01 cm	Ordenii de Classificação		
NE - ESP - ABS	3.640076E-11	1		
NE - ABS - ESP	7.331716E-11	6		
ESP - NE - ABS	4.819985E-11	3		
ESP - ABS - NE	6.178862E-11	4		
ABS - NE - ESP	6.749730E-11	5		
ABS - ESP - NE	4.384213E-11	2		

Método Step Characteristic - Quadratura S ₁₆				
Materiais: Ferro (ESP) - Manganês (ABS) - Platina (NE)				
Fluxo escalar obtido em x = 21 cm				
Comomação	h = 0.01 cm	Ordenii de Classificação		
NE - ESP - ABS	5.321338E-11	1		
NE - ABS - ESP	1.117487E-10	6		
ESP - NE - ABS	7.179567E-11	3		
ESP - ABS - NE	9.670816E-11	4		
ABS - NE - ESP	1.012719E-10	5		
ABS - ESP - NE	6.478041E-11	2		

Tabela 24 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro, Manganês e Platina - 21 cm

Observamos os dados obtidos nas nossas simulações para o fluxo escalar neutrônico nas Tabelas 22, 23 e 24, percebemos que a melhor combinação para uma blindagem, de maneira geral, se dá com a composição dos materiais Manganês, Níquel e Vanádio pois apresentou o menor fluxo escalar neutrônico, utilizando o material absorvedor na nossa região de interesse. Observando as Tabelas 22, 23 e 24 separadamente, percebe-se novamente, em todos as composições de materiais que o menor fluxo neutrônico se dá com o material absorvedor na região 3. O maior fluxo neutrônico obtido se dá com a composição dos materiais NE-ABS-ESP onde o material de espalhamento se encontra na região 3. É importante destacar que todos as composições apresentadas nas Tabelas 22, 23 e 24 estão realizando a blindagem da maneira adequada, no entanto, é mais desejável em todas as combinações apresentadas nessas Tabelas que o material neutro esteja na região 1, o material espalhador se encontre na região 2 e o material absorvedor na região 3.

A seguir apresentaremos os fluxos angulares da simulação anterior, bem como o gráfico contendo a distribuição do fluxo angular para duas direções em todo o domínio.

Método Step Characteristic				
Ma	teriais : Vanádio (N	NE) - Níquel (ES)	P) - Manganês (AB	S)
Direção angular Fluxo angular Direção angular Flu				
	Direçao aligular	em x = 21 cm	Dileçao aligular	em x = 21 cm
	m = 1	6.827976E-10	m = 9	0.000000E+00
Melhor	m = 2	4.174812E-10	m = 10	0.000000E+00
combinação	m = 3	1.710231E-10	m = 11	0.000000E+00
NF - FSP - ABS	m = 4	5.006486E-11	m = 12	0.000000E+00
	m = 5	1.716610E-11	m = 13	0.000000E+00
	m = 6	1.029362E-11	m = 14	0.000000E+00
	m = 7	7.426030E-12	m =15	0.000000E+00
	m = 8	5.697729E-12	m = 16	0.000000E+00

Tabela 25 – Distribuição do fluxo angular de nêutrons para x = 21 cm

Distribuição do Fluxo angular - 21 CM Materiais : Vanádio (NE) - Níquel (ESP) - Manganês (ABS)



Figura 13 – Distribuição do fluxo angular - Materiais: Vanádio-Níquel-Manganês Fonte: Criado pelo próprio autor

Identificamos analisando os dados dispostos na Tabela 25 e Figura 13 que a variação do fluxo angular neutrônico é mais sensível nas interfaces das regiões materiais, pode-se notar também que o fluxo cai consideravelmente na região onde se encontra o material absorvedor.

5.5 Problema modelo D

O problema é heterogêneo, com condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 10$ para $\mu_m > 0$ e $\Psi_m(9) = 0$ para $\mu_m < 0$. A grade possui 9 cm, dividida em três regiões de 3 cm conforme ilustrado na Figura 14. Os parâmetros físicos materiais são os mesmos utilizados no problema anterior e podem ser encontrados na Tabela 2.



Figura 14 – Problema modelo D Fonte: Criado pelo próprio autor

A dinâmica adotada para a realização da composição da grade para esse problema segue a mesma do problema anterior, em que buscamos uma trinca de materiais onde fique cada material de cada tipo em uma região diferente da grade. Para relembrar, escolhemos os materiais Ferro (ESP), Manganês (ABS) e Vanádio (NE). Assim, compomos nossa grade:

- 1)NE (região 1) ESP (região 2) ABS (região 3)
 2) NE (região 1) ABS (região 2) ESP (região 3)
 3) ESP (região 1) NE (região 2) ABS (região 3)
 4) ESP (região 1) ABS (região 2) NE (região 3)
 5) ABS (região 1) NE (região 2) ESP (região 3)
- 6) ABS (região 1) ESP (região 2) NE (região 3)

Com o intuito de não ficarmos repetitivos além dessa combinação descrita acima, realizamos a mesma dinâmica com as trincas: Ferro (ESP), Manganês (ABS) e Platina (NE) e Níquel (ESP), Manganês (ABS) e Vanádio (NE).

Os resultados dessas simulações encontram se dispostos nas Tabelas 26, 27 e 28 que representa o fluxo escalar neutrônico no ponto x = 9 cm sendo nossa região de interesse para a realização da blindagem. Assim como no problema anterior, consideramos como critério para uma blindagem segura, fluxos escalares neutrônicos abaixo ou iguais a ordem de grandeza de 1E-05.

Método Step Characteristic - Quadratura S ₁₆				
Materiais: Ferro (ESP) - Manganês (ABS) - Vanádio (NE)				
Example 2 Fluxo escalar obtido em $x = 9$ cm				
Comomação	h = 0.01 cm	Ofueni de Classificação		
NE - ESP - ABS	2.801624E-04	1		
NE- ABS - ESP	4.335874E-04	6		
ESP - NE- ABS	3.172463E-04	2		
ESP - ABS - NE	3.706198E-04	4		
ABS - NE - ESP	4.240495E-04	5		
ABS - ESP - NE	3.284458E-04	3		

Tabela 26 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro, Manganês e Vanádio - 9 cm

Tabela 27 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Manganês, Níquel e Vanádio - 9 cm

Método Step Characteristic				
Materiais : N	1anganês (ABS) - Níquel (ESP) -	· Vanádio (NE) - 9 cm		
Combinação Fluxo Escalar obtido em 9 cm				
Combinação	h = 0.01 cm	Ordeni de Classificação		
NE - ESP - ABS	4.323327E-05	1		
NE - ABS - ESP	6.824841E-05	6		
ESP - NE - ABS	4.921581E-05	2		
ESP - ABS - NE	5.796110E-05	4		
ABS - NE - ESP	6.598844E-05	5		
ABS - ESP - NE	5.086559E-05	3		

Método Step Characteristic				
Materiais : Ferro (ESP) - Manganês (ABS) - Platina (NE) - 9 cm				
Fluxo Escalar obtido em 9 cm				
Comomação	h = 0.01 cm	Ordeni de Classificação		
NE - ESP - ABS	4.996535E-05	1		
NE - ABS - ESP	8.006447E-05	6		
ESP - NE - ABS	5.740908E-05	2		
ESP - ABS - NE	7.039386E-05	4		
ABS - NE - ESP	7.721978E-05	5		
ABS - ESP - NE	5.888900E-05	3		

Tabela 28 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico utilizando os materiais Ferro, Manganês e Platina - 9 cm

Observando os fluxos escalares neutrônicos no ponto x = 9 cm apresentados pelas Tabelas 26, 27 e 28, percebemos que apesar de reduzirmos a espessura do domínio para 9 cm e os materiais Vanádio (NE), Níquel (ESP) e Manganês (ABS), nessa ordem, continuaram obtendo o menor fluxo escalar neutrônico na região de interesse para a blindagem e portanto continua sendo a melhor combinação. Observando novamente as Tabelas 26, 27 e 28, agora separadamente, percebemos que, a combinação composta por materiais composta por Ferro, Manganês e Vanádio, não é adequada para a realização da blindagem pois os fluxos escalares neutrônicos independente da sua combinação apresentaram - se com ordem de grandeza de 1E-04, acima da tolerância definida nas nossas simulações que se dá abaixo ou igual a 1E-05. É importante destacar que, obtivemos nossa melhor combinação utilizando os materiais Níquel (ESP), Manganês (ABS) e Vanádio (NE), essa combinação que não apresenta fluxo escalar neutrônico abaixo da nossa tolerância possui apenas o material Ferro (ESP) em substituição ao Níquel. Decidimos então investigar esse fato e tendo como base a Tabela 2, percebemos que o material Níquel comparado ao Ferro possui uma seção de choque de absorção maior e por conta disso, quando combinado ao Manganês (ABS) forma-se então uma composição mais efetiva para blindagem. Ou seja, as propriedades absorvedoras de um material espalhador, influencia consideravelmente na realização de uma blindagem.

Abaixo apresentamos a Tabela 29 e um gráfico com os fluxos angulares neutrônico da melhor combinação obtida :

Método Step Characteristic				
Ma	teriais : Manganês	(ABS) - Níquel	(ESP) - Vanádio (N	E)
Direção angular Fluxo angular Direção angular Flu				
	Direçao aligular	em x = 9 cm	Dileçao aligulai	em x = 9 cm
	m = 1	5.178874E-04	m = 9	0.000000E+00
Melhor	m = 2	3.949304E-04	m = 10	0.000000E+00
combinação	m = 3	2.405642E-04	m = 11	0.000000E+00
NF - FSP - ABS	m = 4	1.148212E-04	m = 12	0.000000E+00
	m = 5	4.231967E-05	m = 13	0.000000E+00
	m = 6	1.520415E-05	m = 14	0.000000E+00
	m = 7	9.084551E-06	m =15	0.000000E+00
	m = 8	6.815860E-06	m = 16	0.000000E+00

Tabela 29 – Distribuição do fluxo angular de nêutrons para x = 9 cm

Distribuição do Fluxo angular - 9 CM Materiais : Vanádio (NE) - Níquel (ESP) - Manganês (ABS)



Figura 15 – Distribuição do fluxo angular - Materiais: Vanádio - Níquel- Manganês 9 cm Fonte: Criado pelo próprio autor

Apesar dos valores encontrados para o fluxo escalar atenderem nossas exigências para blindagem, verificamos que os fluxos angulares de algumas direções estão acima dos valores permitidos, assim não poderemos utilizar as blindagens propostas com a espessura de 9 cm. Uma solução seria utilizar materiais com maior seção de choque de absorção e espessuras diferentes para as regiões. A seguir mostraremos uma proposta utilizando de blindagem de 9 cm com regiões de espessuras diferentes e material de alta seção de choque de absorção de nêutrons.

5.6 Problema modelo E

O problema é heterogêneo com condição de contorno prescrita $\Psi_m(0) = 10$ para $\mu_m > 0$ e $\Psi_m(9) = 0$ para $\mu_m < 0$. A grade possui 9 cm, dividida em três regiões onde a região 1, possui 4.5 cm, a região 2 possui 0.1 cm e a região 3 possui 4.4 cm. A única restrição nesse problema é o material Boro se encontrar na região 2 devido seu alto poder de absorção e por ser o único material não metálico pesquisado neste trabalho. De acordo com os estudos feitos por outros pesquisadores como Andia (2009), o Boro é bastante utilizado na confecção de blindagem.





Dessa maneira, adotamos a dinâmica que, fixado o Boro na região 2, variamos os materiais espalhadores e neutros nas demais regiões. Ou seja, se escolhemos os seguintes materiais: Boro (ABS), Ferro (ESP) e Vanádio (NE), teremos as seguintes combinações abaixo:

a) ESP - ABS - NE b) NE - ABS - ESP

Essa dinâmica também foi adotada para os materiais seguintes: Boro (ABS) - Níquel (ESP) - Vanádio (NE) e por fim, Boro (ABS) - Ferro (ESP) - Platina (NE). Para essa simulação a tolerância para uma blindagem segura é da ordem abaixo ou igual a 1E-05 e abaixo constam as Tabelas 30, 31 e 32 que apresentam os resultados obtidos para o fluxo escalar neutrônico utilizando o método Step Characteristic e a quadratura de Gauss-Legendre de ordem dezesseis.

Tabela 30 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico para o problema E utilizando os materiais Ferro, Boro e Vanádio

	Materiais	Materiais
	Região 1: Ferro (ESP)	Região 1: Vanádio (NE)
	Região 2: Boro (ABS)	Região 2: Boro (ABS)
	Região 3: Vanádio (NE)	Região 3: Ferro (ESP)
x (cm)	Fluxo escalar de nêutrons	Fluxo escalar de nêutrons
0	6.965838E+00	5.844178E+00
4.5	9.007194E-02	1.068966E-01
4.6	9.977641E-07	2.103072E-06
9.0	5.695864E-08	6.913167E-08
Iterações	60	59

Tabela 31 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico para o problema modelo E utilizando os materiais Níquel, Boro e Vanádio

	Materiais	Materiais
	Região 1: Níquel (ESP)	Região 1: Vanádio (NE)
	Região 2: Boro (ABS)	Região 2: Boro (ABS)
	Região 3: Vanádio (NE)	Região 3: Níquel (ESP)
x (cm)	Fluxo escalar de nêutrons	Fluxo escalar de nêutrons
0	6.888701E+00	5.844178E+00
4.5	5.311019E-03	1.068966E-01
4.6	6.131874E-08	2.069366E-06
9.0	3.512427E-09	4.561673E-09
Iterações	71	70

	Materiais	Materiais
	Região 1: Ferro (ESP)	Região 1: Platina (NE)
	Região 2: Boro (ABS)	Região 2: Boro (ABS)
	Região 3: Platina (NE)	Região 3: Ferro (ESP)
x (cm)	Fluxo escalar de nêutrons	Fluxo escalar de nêutrons
0	6.965838E+00	5.946468E+00
4.5	9.007195E-02	7.883931E-03
4.6	1.022581E-06	1.705480E-07
9.0	5.130863E-09	5.657159E-09
Iterações	61	61

Tabela 32 – Distribuição do fluxo escalar neutrônico para o problema modelo E utilizando os materiais Ferro, Boro e Platina

Para esse problema a tolerância exigida continua sendo fluxos escalares neutrônicos abaixo ou iguais a ordem de grandeza de 1E-05. Observando os dados apresentados nas Tabelas 30, 31 e 32, diagnosticamos que todas as combinações realizadas poderão ser usadas para a realização eficiente de uma blindagem. Além disso, percebemos que a combinação de materiais que apresentou o menor fluxo escalar neutrônico foi Níquel (ESP) - Boro (ABS) - Vanádio (NE), necessariamente nessa ordem de disposições nas regiões, portanto é nossa melhor composição para a realização da blindagem.

Abaixo apresentamos a Tabela 33 e a Figura 17 que constam os fluxos angulares de nêutrons da melhor combinação obtida:

Método Step Characteristic				
Materiais : Níquel (ESP) - Boro (ABS) - Vanádio (NE)				
Melhor combinação ESP - ABS -NE	Direção angular	Fluxo angular	Direção angular	Fluxo angular
		em x = 9 cm		em x = 9 cm
	m = 1	5.383962E-08	m = 9	0.000000E+00
	m = 2	2.897570E-08	m = 10	0.000000E+00
	m = 3	1.098340E-08	m = 11	0.000000E+00
	m = 4	5.378401E-09	m = 12	0.000000E+00
	m = 5	4.237353E-09	m = 13	0.000000E+00
	m = 6	3.452121E-09	m = 14	0.000000E+00
	m = 7	2.678870E-09	m =15	0.000000E+00
	m = 8	2.050978E-09	m = 16	0.000000E+00

Tabela 33 – Distribuição do fluxo angular neutrônico para x = 9cm utilizando os materiais Níquel, Boro e Vanádio



Distribuição do Fluxo Angular - 9 cm Materiais: Níquel (ESP) - Boro (ABS) - Vanádio (NE)

Figura 17 – Distribuição do fluxo angular de nêutrons - Materiais: Níquel-Boro-Vanádio Fonte: Criado pelo próprio autor

Ainda analisando os dados da Tabela 31, sabemos que para termos uma blindagem eficiente é necessário uma alta redução do fluxo neutrônico e percebemos que essa fina camada de Boro na pequena região 2 é suficiente para diminuir consideravelmente o fluxo de nêutrons na região onde se encontra, e no caso onde obtivemos nossa melhor combinação, Níquel (ESP) - Boro (ABS) - Vanádio (NE), respectivamente, a ordem de grandeza mudou de 1E-03 para 1E-08. Identificamos também que nas interfaces das regiões onde os materiais ocorre uma variação do fluxo angular neutrônico. De maneira geral, percebemos através dos resultados obtidos nas simulações que o Boro é um material essencial para a realização da blindagem.

6 Conclusões e Trabalhos Futuros

Neste trabalho fizemos estudos e simulações de problemas de fonte fixa, particularmente blindagem de nêutrons. Estas simulações permitiram analisar o comportamento de diferentes métodos numéricos, permitindo definir parâmetros para as simulações. Verificamos, através das nossas simulações, que existe uma influência da ordem da quadratura angular na obtenção do fluxo escalar e angular neutrônico. Identificamos também que para os problemas apresentados, os ganhos de precisão alcançados com quadraturas de ordem superior a S₁₆,não compensam em função do incremento do custo computacional e que com esta quadratura conseguimos resultados satisfatórios utilizando malhas finas (h = 0.01 cm) com o método Step Characteristic.

Com a simulação de problemas modelo podemos identificar o perfil do fluxo escalar de nêutrons para diferentes tipos de materiais categorizados como neutros, absorvedores e espalhadores. Combinamos estes tipos de materiais e identificamos a melhor disposição para blindagem de nêutrons que foi Vanádio, Níquel e Manganês, nesta ordem.

Simulamos blindagens de diferentes espessuras, na primeira bateria de simulações, utilizamos um domínio linear de 21 cm e identificamos que nas simulações, o fluxo escalar já tinha sido reduzido para um valor muito abaixo 1E-05 e por este motivo fizemos uma bateria de simulações similares as anteriores com um domínio de 9 cm de comprimento. Nesta nova bateria de simulações, encontramos blindagens que atendiam e não atendiam a exigência de fluxo escalar na ordem de 1E-05, selecionamos o melhor caso e analisamos os fluxos angulares na extremidade do domínio (x = 9 cm) e constatamos que os fluxos angulares de algumas direções emergentes não atendiam a exigência imposta. Notamos nas zonas de interface entre as regiões, o aumento do fluxo de nêutrons no inicio da zona formada de materiais espalhadores.

A seguir fizemos uma nova simulação com domínio heterogêneo de 9 cm, utilizando um material altamente absorvedor o Boro (B) em uma fina camada (0,1 cm) na região intermediária do domínio. Nesta simulação obtivemos resultados satisfatórios para os fluxos angulares e escalares.

Neste trabalho, a escolha dos materiais foi baseada somente nos dados das seções de choque total e de espalhamento disponibilizados na literatura. Em trabalhos futuros, devem ser levados em consideração outras características dos materiais, como por exemplo, o custo e o ponto de fusão, bem como características referentes à fonte de nêutrons, o meio exterior, valores reais de proteção radiológica. Propomos também simulações multidimensionais para domínios realísticos.

Referências

ADAMSL, M.; LARSEN, E. W. Fast Iterative Methods for Discrete - Ordinates Particule Transport Calculations. Progress in Nuclear Energy: p.3–159,vl.40, n.1, 2002.

ALMEIDA, A. B. de. **Caracterização químico-mineralógica de minérios de manganês**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2010.

ANDIA, J. P. M. **Remoção de Boro de Águas e Efluentes de Petróleo por Adsorção**. 120 p. Tese (Doutorado) — Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, PUC/RJ, Rio de Janeiro-RJ, 2009.

BADRUZZAMAN, A. Nodal methods in transport theory. In: Advances in Nuclear Science and Technology. New York: Plenum Press: p. 293–331, vl.21, 1990.

BARROS, R. C. de. A Spectral Nodal Method for The Solution of Discrete Ordinates Problems in One and Two Dimensional Cartesian Geometry. Dissertação (Mestrado) — University of Michigan, 1990.

BELL, G.; GLASSTONE, S. Nuclear Reactor Theory. 1. ed. USA: New York: Van Nostrand Reinhold, 1970.

BOLSONI, A. T. **Síntese, caracterizaçã e estudos das propriedades catáliticas de compostos formados por óxidos de tungstênio e pentóxido de vanádio**. 115 p. Tese (Doutorado) — Universidade de São Paulo, USP, São Paulo - SP, 2011.

BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gasmolekülen. **Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften zu Wien**, v. 66, p. 275–370, 1872.

BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Análise numérica. 8. ed. São Paulo: Cengage Learning, 2011.

CAMPOS, T. P. R. Considerações sobre a terapia de captura de nêutrons pelo boro. **Revista Brasileira de Cancerologia**, v. 46, p. 283–92, 2000.

CAMPOS, T. P. R.; BRANDãO, S. d. F. Dosimetria comparativa da braquiterapia por balão de i-125 e por cf-252 associada a bnct para tumores cerebrais. **Radiologia Brasileira**, v. 46, p. 221–226, 2013.

CARLSON, B.; LATHROP, K. **Transport theory-the method of discrete ordinates**. New York: Gordon and Breach, 1968.

CASE, K. M.; ZWEIFEL, P. F. Linear Transport Theory. Adisson - Wesley, Publishing Company, Inc: Massachusetts, USA, 1967.

CASTAGNET, A.; BARDAL, L.; SAID, M. **Aplicação de radioisótops nas indústrias do petróleo, gás e petroquímica**. São Paulo: Instituto de Energia Atômica, cap 2, 1975.

CHANDRASEKHAR, S. Radiotive Transfer. New York, USA: Dover Publications, 1960.

COMISSÃO NACIONAL DE ENGENHARIA NUCLEAR. **Diretrizes básicas de radioproteção**. Rio de Janeiro-RJ, 2005. DARLING, T. Well Logging and formation evaluation. USA: Elsevier, 2005.

DEPARTAMENTO NACIONAL DE PRODUÇÃO MINERAL. **Sumário Mineral**. São Paulo-SP, 2015. Disponível em: http://www.dnpm.gov.br/dnpm/sumarios/sumario-mineral-2015>.

DUDERSTADT, J.; HAMILTON, L. Nuclear Reactor Analysis. New York: John Wiley & Sons Inc, 1975.

ELLIS, D. V.; SINGER, J. M. Well Logging for Earth Scientists. 2. ed. USA: Springer, 2007.

FILHO, H. A. **Um Método Espectro - Nodal para problemas de Autovalor na Teoria de Transporte de Nêutrons segundo a Formulação de Ordenadas Discretas**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, 1999.

FREITAS, L. da S. **Avaliação dos minérios itabiritos compactos e semi compactos em um circuito de biritagem da Samarco/Mineração S/A**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Minas Gerais, 2014.

FRIZZO, S. J. **Prospecção geoquimica de elementos do grupo da platina através de concentrados de bateia de solos - Poço redondo (SE)**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal da Bahia, 1991.

GAVAZZA, S. **Cálculo de Parâmetros de um experiemento de blindagem**. Dissertação (Mestrado) — Instituto Militar de Engenharia, 1986.

GRUBBÉ, E. . Who was the first to make use of the therapeutic qualities of the x ray. **Radiological Review XXII**, p. 184–187, 1933.

HAGHIGHAT, A. Monte Carlo Methods for Particle Transport. Boca Raton FL: Prentice Hall, 2014.

IMBELLONI, A. M. **Concentração do minério de níquel da mineração Fortaleza de Minas**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal de Ouro Preto, 2013.

INSTITUTO BRASILEIRO DE MINERACÃO. Perspectivas da Mimundo Brasil. São Paulo-SP, 2014. Disponível e no neração no <https://www.pwc.com.br/pt/eventos-pwc/mining-day/assets/ em: 1-mining-day-2014-cenario-brasileiro-marcelo-tunes.pdf>.

KNOLL, G. F. **Radiation Detection and Measurement**. 4. ed. Michigan, USA: John Wiley Sons, Inc, 2010.

LAMARSH, J.; BARATTA, A. Introduction to Nuclear Engineering. New Jersey: Prentice Hall, 2001.

LAWRENCE, R. D. Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations. **Progress in Nuclear Energy**, v. 17, p. 271–301, 1986.

LEWIS, E. E.; MILLER, W. J. **Computational Methods of Neutron Transport**. 1. ed. New York: John Wiley & Sons Inc, 1984.

MAUCH, P.; LOEFFLER, J. **Radiation oncology technology and biology**. Philadelphia: W. B. Saunders, 1993.

MINISTÉRIO DO TRABALHO E EMPREGO. **Programa Segurança e Saúde no trabalho em estabelecimentos de saúde**. Brasilia-BR, 2005.

MIRANDA, A. I. F. **Imageamento da porosidade através de perfis geofísicos de poço**. 58 p. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Pará, Belém-PA, 2004.

NUNES, C. E. de A. **Condições de contorno Albedo para cálculos globais de reatores nucleares térmicos com o modelo de ordenadas discretas a dois grupos de energia**. Dissertação (Mestrado) — Universidade do Estadual do Rio de Janeiro, UERJ, 2011.

OKUNO, E. Radiação-Efeitos, riscos e benefícios. 2. ed. Brasil: Harbra, 1998.

OLIVEIRA, F. B. S. Problema inverso de reconstrução analítica aproximada da solução da equação de transporte de partículas neutras monoenergéticas em geometria unidimensional cartesiana com espalhamento isotrópico. 66 p. Tese (Doutorado) — Universidade do Estadual do Rio de Janeiro, IPRJ/UERJ, Rio de Janeiro-RJ, 2007.

OSBORN, R.; YIP, S. **The Foundations of Neutron Transport Theory**. New York: Gornon & Breach, 1966.

OTTO, A. C. Estudo e aplicação de códigos ANISN, DOT 3.5 a problemas de blindagem de radiações nucleares. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Pesquisas energéticas e nucleares,IPEN- USP, 1983.

PEIXOTO, E. M. A. **Elemento Quimico Boro**. Quimica Nova na Escola: [s.n.], 1996. Disponível em: http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc04/elemento.pdf>.

PEREZ, C.; BRADLE, L. **Principles and Practice of Radiation Oncology**. 3. ed. USA: Lippincott - Raven, 1997.

RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. d. R. Cálculo numérico - Aspéctos Teóricos e Computacionais. 2. ed. São Paulo: Pearson, 2011.

SCHULZ, D. M. **Métodos Análiticos e Computacionais em Geofísica Nuclear**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2014.

SERVOR, I. V.; JOHN, J.; HOOGENBOOM, J. A new efective monte carlo midway coupling method in mcnp applied to a well logging problem. **Applied Radiation and Isotopes**, p. 1737–1744, 1998.

SILVA, L. C. R. P. da. **Metodologia para minimização de doses ocupacionais em instalações radiativas com aceleradores cíclotrons**. 117 p. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro-RJ, 2010.

SPECHT, H. M.; NEFF, T.; REUSCHEL, W.; WAGNER, F. M.; KAMPFER, S.; WILKENS, J.; PETRY, W.; COMBS, S. Paving the road for modern particle therapy – what can we learn from the experience gained with fast neutron therapy in munich? **Frontiers in Oncology-Radiation Oncology**, 2015.

TAUAHATA, L.; SALATI, I.; PRINZIO, R. D. **Radioproteção E Dosimetria : Fundamen-tos**. 10^a. ed. RIO DE JANEIRO: IRD/CNEN, 2014. 345 p. ISBN 9788567870021.

THOMAS, J. E. **Fundamentos de engenharia de petróleo**. Rio de Janeiro: Interciência, 2001.

ZIENKIEWICZ, O. C. **The Finite Element Methdos in Engineering Sience**. 2. ed. New York, USA: McGraw-Hill, 1971.