

ST7-E

ESTUDO E APLICAÇÃO DO CÓDIGO MORSE EM PROBLEMAS  
DE BLINDAGEM DAS RADIAÇÕES

W.J. Vieira  
A.G. Mendonça  
J.R. Maiorino

Divisão de Física de Reatores - RTF  
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares  
CNEN/SP  
Cidade Universitária - São Paulo

SUMÁRIO

Neste trabalho procura-se <sup>Mostra-se</sup> ~~mostrar~~ a operacionalidade do código MORSE dentro da estrutura de cálculo do grupo de blindagem e transporte da radiação do IPEN.

Para este propósito foram resolvidos três problemas amostras publicados na literatura para comparação dos resultados obtidos. É apresentado também uma pequena introdução sobre a construção lógica e potencialidades do código.

## 1 - Introdução

Este trabalho visa situar o código MORSE [5] dentro da metodologia utilizada para cálculo de blindagem de radiações pelo grupo da blindagem e transporte da radiação da RTF/IPEN [6] .

Primeiramente faz-se uma introdução ao método de Monte Carlo , enfatizando a aplicação e o status atual deste método na engenharia nuclear. Em seguida, baseado nos trabalhos de R.R. Coveyou et alli [5] e E. Straker [1] , procurou-se, com simplicidade, colocar o problema do transporte da radiação, a estrutura lógica e as potencialidades do código MORSE.

Foram selecionados três problemas da literatura para ilustração da operacionalidade do código. Os problemas: 1. Fluência de neutrons e raios gama secundários através de uma placa de polietileno borado [9] , 2. Teste de cálculos padrões utilizando códigos bidimensionais (R,Z) de transporte de radiação [1] e, 3. Corrente de neutrons ao longo de um canal refrigerante de sódio [4] . Os resultados obtidos demonstram a boa performance do código MORSE na solução de problemas típicos de blindagem.

## 2 - Algumas Considerações sobre o Método de Monte Carlo

O termo Monte Carlo apareceu na literatura pela primeira vez no trabalho de Metropolis e Ulam [7] em 1949. Este método, desenvolvido originariamente por Neumann, Fermi e Ulam, vem desde esta época tornando-se cada vez mais importante particularmente no campo da física e engenharia nucleares.

O método de Monte Carlo é uma técnica de análise numérica que utiliza a amostragem estatística para a solução de problemas físicos ou matemáticos. Um modelo estocástico é amostrado de distribuições de probabilidade apropriadas que representam o sistema sendo simulado, estimando as respostas requeridas por intermédio de médias estatísticas. No tratamento do transporte de partículas, os métodos probabilísticos utilizados podem necessitar de uma análise estatística bastante rigorosa para justificá-los plenamente [2]. Entretanto o método de Monte Carlo é bastante intuitivo e requer geralmente apenas os fundamentos básicos da teoria de probabilidades. Estes fundamentos devem ser obedecidos durante todo o processo de cálculo e interpretação dos resultados obtidos.

Pode-se considerar o método Monte Carlo como um método estocástico para solução de problemas determinísticos, ou, para simulação de processos estocásticos. Para a simulação do transporte de partículas em geometrias complexas, não se considera o problema da derivação de equações que descrevem de uma forma relativamente acurada os processos de transporte, nem a solução destas equações por aproximações numéricas. No método Monte Carlo o procedimento consiste em simular microscópicamente o processo de transporte em todos os seus aspectos significativos, isto é, o nascimento da partícula, o caminho percorrido até sofrer uma colisão, os parâmetros de colisão, os parâmetros que a partícula adquire após a colisão e sua "morte" através da absorção, fuga ou outro parâmetro apropriado, e repetindo este processo para um número de partículas, tal que o parâmetro sendo calculado tenha significância estatística. Na figura 1 ilustra-se o mecanismo acima descrito.

Em Monte Carlo, seguir partículas através da descrição geométrica de um dado sistema envolve grande parte do tempo de computação. Desta forma, a acuidade da descrição dos processos de colisão ou de uma região do espaço de fase não afeta muito o tempo para obtenção das respostas requeridas. Tal característica não ocorre nos outros métodos, onde a adição de uma nova dimensão, o aumento do número de grupos, ou de intervalos espaciais ou angulares torna a solução do problema crítica. Portanto o método de Monte Carlo é um dos métodos de cálculo que permite a mais detalhada descrição de um sistema, principalmente em poder-se tratar geometrias complexas.

### 3 - O Código de MORSE

O código MORSE é um código que utiliza o método de Monte Carlo para o cálculo da distribuição de qualquer partícula cujo processo de transporte possa ser representado pela equação linear de Boltzmann e cujos processos de interação possam ser descritos por seções de choque de multigrupo.

Para a representação integral da equação Boltzmann considere uma partícula que aparece em uma dada região  $V$  segundo uma distribuição  $S$ . A probabilidade que a localização desta partícula esteja em um pequeno volume  $dx$  em torno de  $x$  é  $S(x)dx$ . Considerando também que uma partícula sofrendo uma colisão em  $dx$  em torno de  $x$  é absorvida com probabilidade  $\sigma_a(x)$ , isto significa que com probabilidade  $\sigma_s(x)$ , ocorre outro evento em  $dy$  em torno de  $y$  com probabilidade  $K(x,y)dy/\sigma_s(x)$ .

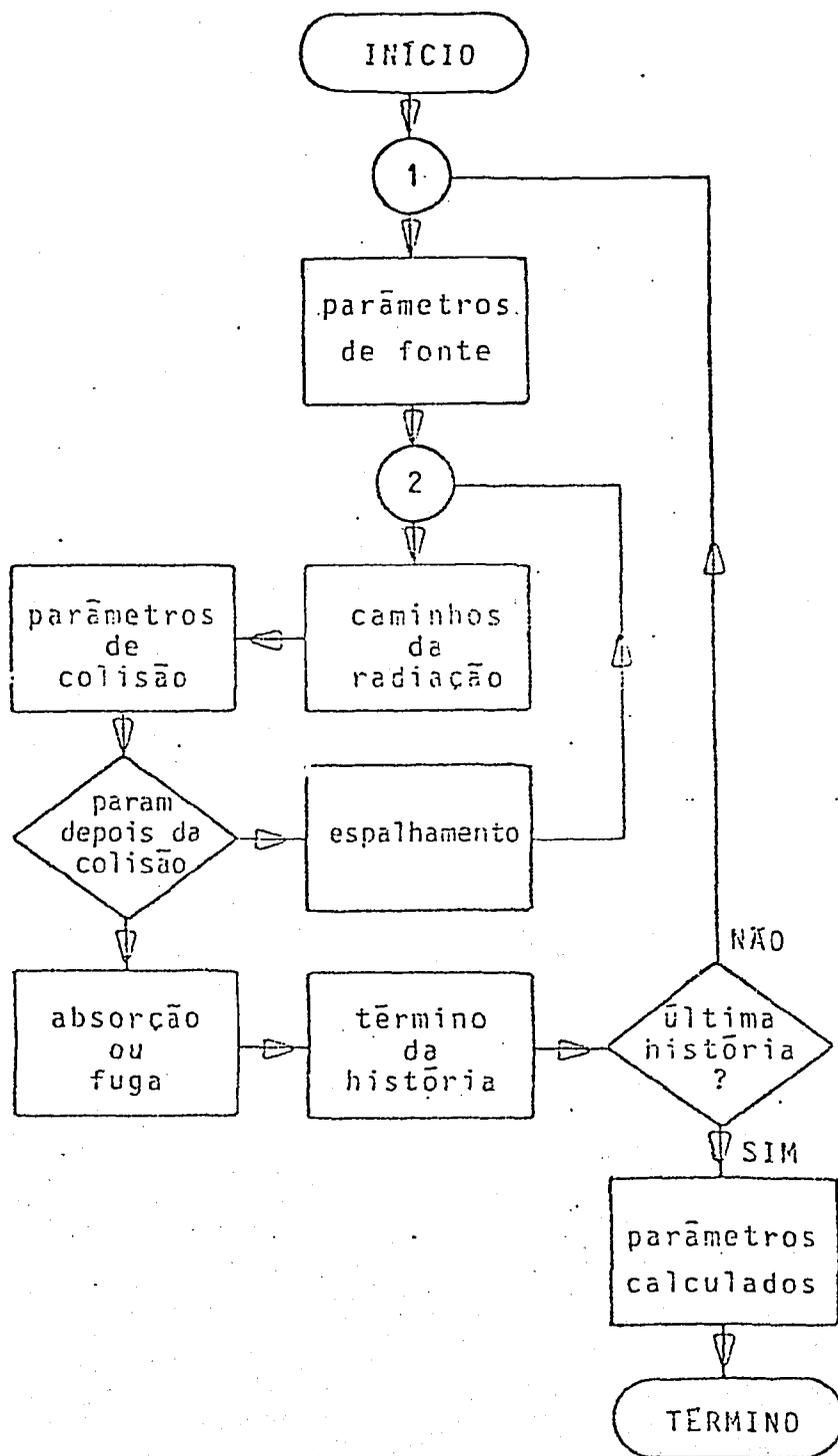


Fig. 1 - Diagrama de blocos de uma aplicação do método de Monte Carlo em processos de transporte.

Para que  $S(x)$  seja uma função fonte para um processo estocástico é necessário que  $S(x) \geq 0$  e,

$$\int S(x) dx = 1. \quad (1)$$

Para que  $K(x,y)$  seja o kernel de transporte para tal processo, é requerido que, para cada  $x$  e  $y$ ,  $K(x,y) \geq 0$  e, para cada  $x$ ,

$$0 \leq \int K(x,y) dy = \sigma_s(x) = 1 - \sigma_a(x) \leq 1 \quad (2)$$

As condições acima garantem a existência de funções não negativas  $f$  e  $g$ , tal que:

$$\int f(w) K(w,x) dw = \mu f(x) \quad (3.1)$$

e

$$\int K(x,y) g(y) dy = \mu g(x), \quad (3.2)$$

onde  $0 \leq \mu \leq 1$ . Isto significa que todas partículas em sistemas não multiplicativos serão mortas com probabilidade 1 [10].

Se a probabilidade de que a partícula sofra mais de uma colisão em  $dx$  em torno de  $x$  for negligível, isto significa que a probabilidade da partícula sofrer uma colisão é numericamente igual ao nº esperado de tais colisões. Estas quantidades podem ser denotadas por  $E(x)dx$ , onde  $E(x)$  é chamada densidade de colisões ou mais genericamente, densidade de eventos.

Para cada partícula o número esperado de eventos iniciais em  $dx$  em torno de  $x$  é  $S(x)dx$ . Analogamente, o número esperado de eventos secundários neste volume é dado por

$$\int E(w) [K(w,x) dx] dw, \quad (4)$$

que significa o número esperado de eventos ocorrendo em  $dw$  perto de  $w$ , multiplicado pela probabilidade  $K(w,x)dx$  de que um evento em  $w$  seja seguido por outro em  $dx$  em torno de  $x$  e, integrado sobre todos os locais predecessores. Desta forma

$$E(x)dx = S(x)dx + \int E(w) [K(w,x) dx] dw, \quad (5)$$

e

$$E(x) = S(x) + \int E(w) K(w,x) dw. \quad (6)$$

As equações 5 e 6 representam respectivamente, relações entre as quantidades e densidades envolvidas. A equação 6 pode ser generalizada para um ponto  $P$  do espaço de fase, isto é,

$$E(P) = S(P) + \int E(P') K(P',P) dP'. \quad (7)$$

Um parâmetro de interesse  $\lambda$  é encontrado integrando o produto da função resposta  $f(P)$  e a densidade de colisões sobre o espaço de fase, isto é,

$$\lambda = \int f(P) E(P) dP. \quad (8)$$

A solução da equação 7 pelo método de Monte Carlo é realizada encontrando os termos  $E_m(P)$  da representação por série de Neumann, onde  $E_0(P)$  é o termo de fonte e cada termo subsequente é encontrado do termo anterior fazendo a amostragem do kernel  $K(P',P)$ , isto é,

$$E(P) = \sum_{m=0} E_m(P), \quad (9)$$

com  $E_0(P) = S(P)$  e,

$$E_m(P) = \int E_{m-1}(P') K(P',P) dP'. \quad (10)$$

O cálculo da densidade de colisões não fornece por si só a resposta de interesse, mas a contribuição de cada colisão em  $\lambda_m$  pode ser calculada por

$$\lambda_m = \int f(P) E_m(P) dP, \quad (11)$$

e a estimativa total dada pela soma sobre as colisões

$$\lambda = \sum_{m=0} \lambda_m. \quad (12)$$

A figura 2 mostra os principais módulos do código. O módulo SOURCE amostra uma partícula em  $P$  de  $S(P)$  e o módulo ANALYSIS estima a contribuição  $\lambda_0$  em  $\lambda$ . O módulo GEOMETRY é necessário para seguir a partícula de colisão à colisão e, uma rotina COLLISION determina a perda de energia, mudança de direção e gerações secundárias em uma colisão. Este processo termina somente se a partícula escapar ou se tornar "não importante". O módulo CROSS SECTION fornece informações para os processos de colisão e de triagem da partícula. O módulo ANALYSIS pode ser necessário durante o processo de triagem através dos estimadores de caminho percorrido por unidade de volume ou de interface e, também, nos locais da colisão através dos estimadores densidade de colisão ou de próximo evento.

A figura 3 mostra a hierarquia das subrotinas no código MORSE. A subrotina INPUT controla a entrada para o problema geral e para todos os outros módulos. O módulo CROSS SECTION possui interface através da subrotina XSEC que controla toda alocação de espaço para as seções de choque e o reprocessamento destas em probabilidades.

A subrotina BANKR é a interface do módulo ANALYSIS e controla as chamadas das rotinas necessárias para os estimadores utilizados. O módulo GEOMETRY tem interface através da subrotina GOMST que retorna um novo local de colisão, tendo como entrada o local anterior, os cosenos diretores e o livre caminho médio. A subrotina TIME inicia o módulo RANDOM WALK que controla o armazenamento, a recuperação, a triagem e eliminação das partículas. A subrotina MSOUR é a interface para geração das partículas de fonte que formam um grupo ("batch"). A subrotina COLISN determina o grupo e a direção das partículas.

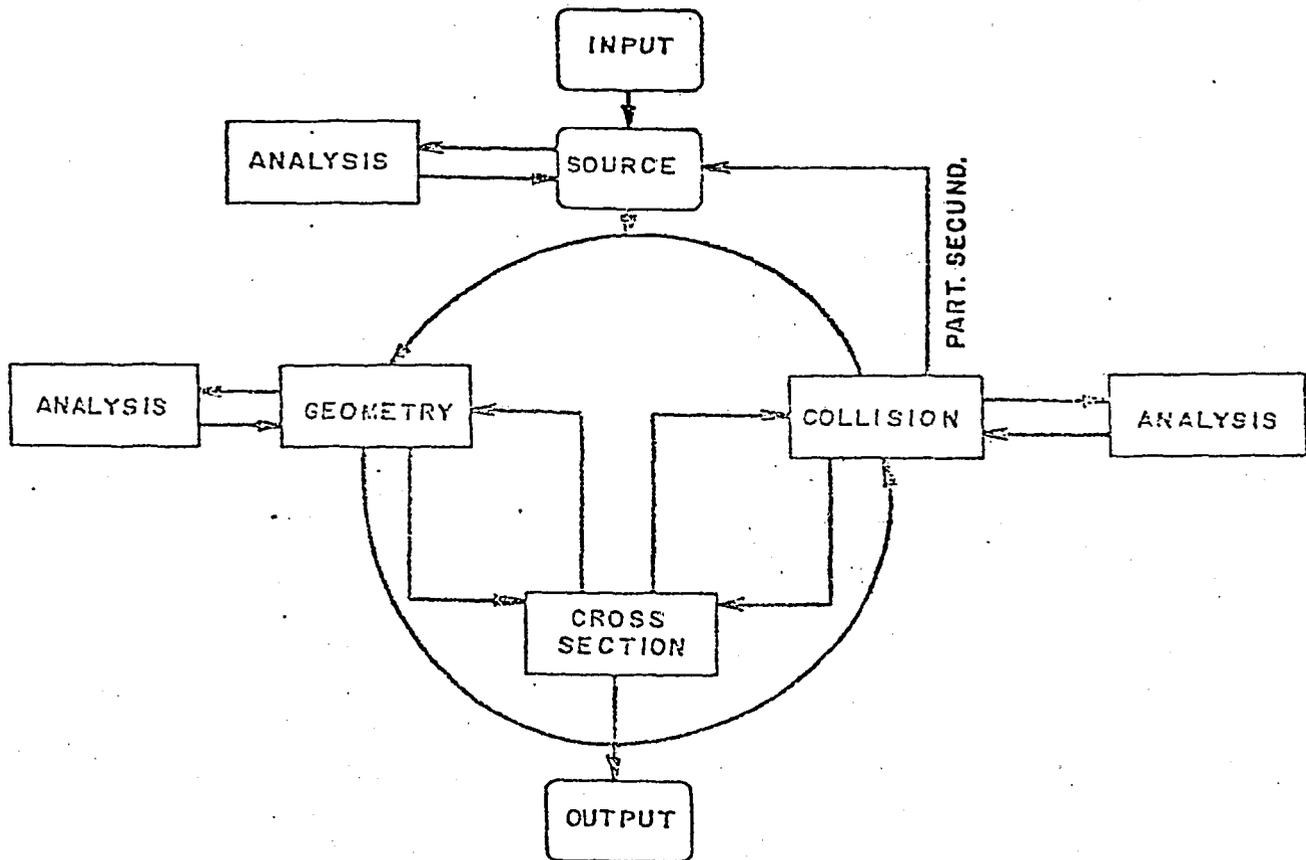


Fig. 2 - Diagrama lógico do código MORSE.

O módulo DIAGNOSTIC fornece a saída das variáveis especificadas nos COMMONs e para várias partes do "BLANK COMMON". Este módulo é bastante útil na análise de erros dado que a subrotina HELP pode ser chamada em qualquer lugar sem afetar o processo do RANDOM WALK.

V. Cain escreveu um módulo ANALYSIS chamado SAMBO [5], que realiza a maior parte do armazenamento dos parâmetros necessários. Este módulo facilita muito a programação necessária para a análise. A análise é feita seguindo uma partícula até que ela se torne "não importante". As contribuições para o efeito de interesse são determinadas e armazenadas em vetores apropriados por grupo, idade, número de detector e direção.

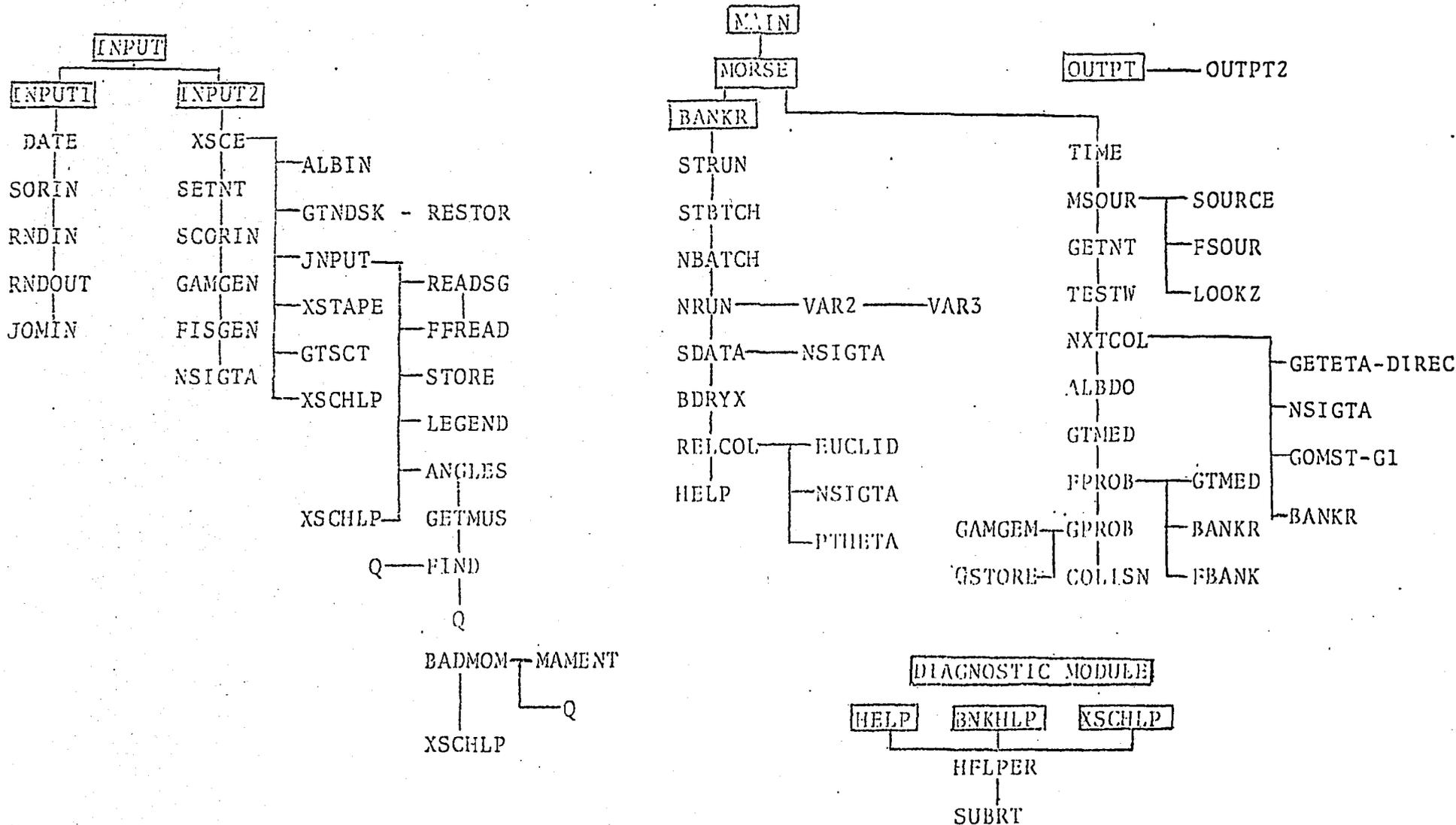


Fig. 3 Hierarquia das subrotinas no código MORSE.

Tabela 2. Cálculo da fluência para várias posições do detetor.

detetor	1	2	3	4
cosseno	0,98561	0,8962	0,73218	0,1447
angulo	9,7°	26,3°	42,9°	81,7°

Neutrons		<u>Publicados</u>			
	MORSE(A)	1,61E-9(1)*	1,35E-9(1)	9,40E-10(1)	7,69E-11(3)
	MORSE(S)	1,65E-9(1)	1,37E-9(1)	9,40E-10(1)	8,99E-11(3)
2,54cm	<u>Obtidos</u>				
	MORSE(A)	1,59E-9(1)	1,33E-9(1)	9,23E-10(2)	7,52E-11(9)
	MORSE(S)	1,63E-9(4)	1,39E-9(4)	9,75E-10(4)	9,32E-11(19)
	<u>Publicados</u>				
	MORSE(A)	3,72E-10(4)	2,85E-10(5)	1,69E-10(6)	1,08E-11(16)
	MORSE(S)	3,60E-10(3)	2,72E-10(3)	1,59E-10(4)	1,06E-11(11)
15,24cm	<u>Obtidos</u>				
	MORSE(A)	3,48E-10(8)	2,68E-10(9)	1,60E-10(10)	1,10E-11(27)
	MORSE(S)	3,77E-10(4)	2,89E-10(4)	1,72E-10(6)	1,30E-11(13)

Gammas		<u>Publicados</u>			
	MORSE(A)	8,45E-10(4)	7,93E-10(4)	6,75E-10(4)	9,27E-11(6)
	MORSE(S)	8,87E-10(3)	8,30E-10(3)	7,08E-10(3)	9,66E-11(5)
15,24cm	<u>Obtidos</u>				
	MORSE(A)	5,71E-10(17)	5,48E-10(17)	4,78E-10(17)	7,1E-11(22)
	MORSE(S)	7,45E-10(7)	7,29E-10(7)	6,31E-10(8)	8,79E-11(16)

( ) \* desvio padrão em %.

Depois que a história de uma partícula é terminada, outra partícula é recuperada de um banco. Acabando as partículas do banco, terminou se o grupo (batch) e um novo conjunto de partículas de fonte é selecionado e armazenado no banco e o processo é repetido. Terminados os grupos tem-se uma corrida (run). Este conceito história-grupo-corrida é aplicado segundo o teorema do limite central, para o cálculo da estatística e os resultados são fornecidos pela subrotina NRUN.

Sabendo que a física dos processos de colisão está incluída na preparação das seções de choque, isto significa que qualquer partícula pode ser triada pelo MORSE. Um novo código de processamento de seções de choque não é necessário desde que as mesmas seções de choque para o ANISN, DOT ou DTF-IV são utilizadas. As seções de choque são misturadas, se necessário, e convertidas em tabelas de probabilidade. O ângulo de espalhamento é tratado determinando ângulos e probabilidades discretas que batem exatamente com os momentos da distribuição angular (expansão de Legendre) para cada transferência grupo-a-grupo.

Desde que as seções de choque em multigrupo são utilizadas, a produção e transporte de raios gama secundários podem ser incluídos. As seções de choque de produção de raios gama são tratadas como transferências grupo-a-grupo. Assim, problemas de neutrons, de gamas, de neutrons e gamas, incluindo fissão, podem ser tratados. E também pode-se obter a solução adjunta.

Outras capacidades incluem a dependência temporal, uma opção de albedo nas fronteiras de materiais, geometria tridimensional generalizada e uma lógica sequencial para a amostragem por importância. Pela entrada de números, a energia da fonte, a seleção do caminho percorrido e a energia perdida no espalhamento podem ser forçadas. Também, não-fuga, roleta russa e fracionamento podem ser utilizadas. Um dos nossos trabalhos atuais é encontrar um procedimento para derivar os parâmetros da amostragem por importância, que também podem ser calculados por tentativa e erro.

#### 4 - Resultados e Comparações

A figura 4 ilustra a geometria do problema 1. Os cálculos foram realizados conforme a publicação original [9], utilizando dois estimadores de próximo evento levemente diferentes. O estimador S faz estimativas para um grupo de saída selecionado, e o estimador A faz estimativas para todos os grupos de baixa energia. Os resultados obtidos para as espessuras de placa de 2,54 e 15,24cm encontram-se ilustrados na tabela 2.

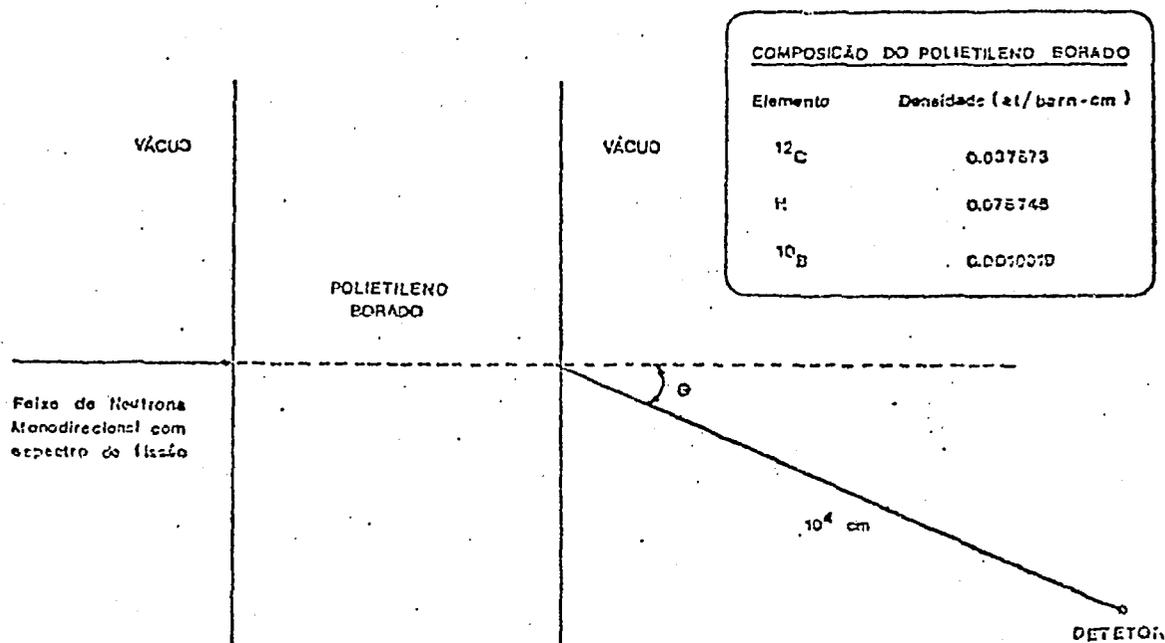


Fig. 4 - Esquema de cálculo para o problema 1.

Na figura 5 ilustra-se a configuração cilíndrica para o problema 2. Este problema foi proposto e analisado por T. Asaoka [1] em um modelo de tres grupos e hipótese de espalhamento linearmente anisotrópico. Para a solução deste problema a rotina SOURCE foi modificada para amostrar partículas uniformemente distribuídas dentro do volume da fonte. A figura 7 ilustra uma comparação entre os resultados obtidos neste trabalho e os resultados obtidos por Otto [8].

O problema 3 tem como objetivo o cálculo de blindagem para reatores rápidos. Na figura 6 ilustra-se a geometria para o canal refrigerante de sódio. Este problema foi proposto e solucionado por E. Amin [4]. A tabela 3 ilustra uma comparação entre os resultados obtidos e os resultados obtidos por Otto [8]. Neste problema foi necessário modificações na subrotina SOURCE para amostragem de partículas com distribuição angular uniforme no hemisfério inferior da fonte e distribuídas também uniformemente na superfície circular de raio 103cm.

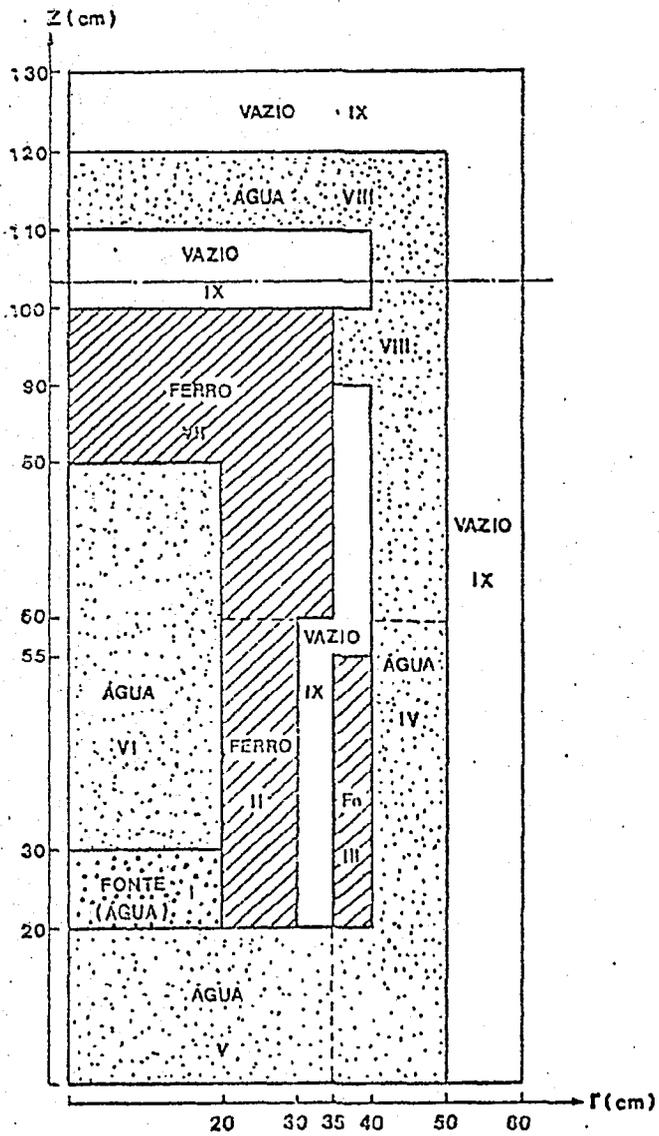


Fig. 5 - Configuração cilíndrica para o problema 2.

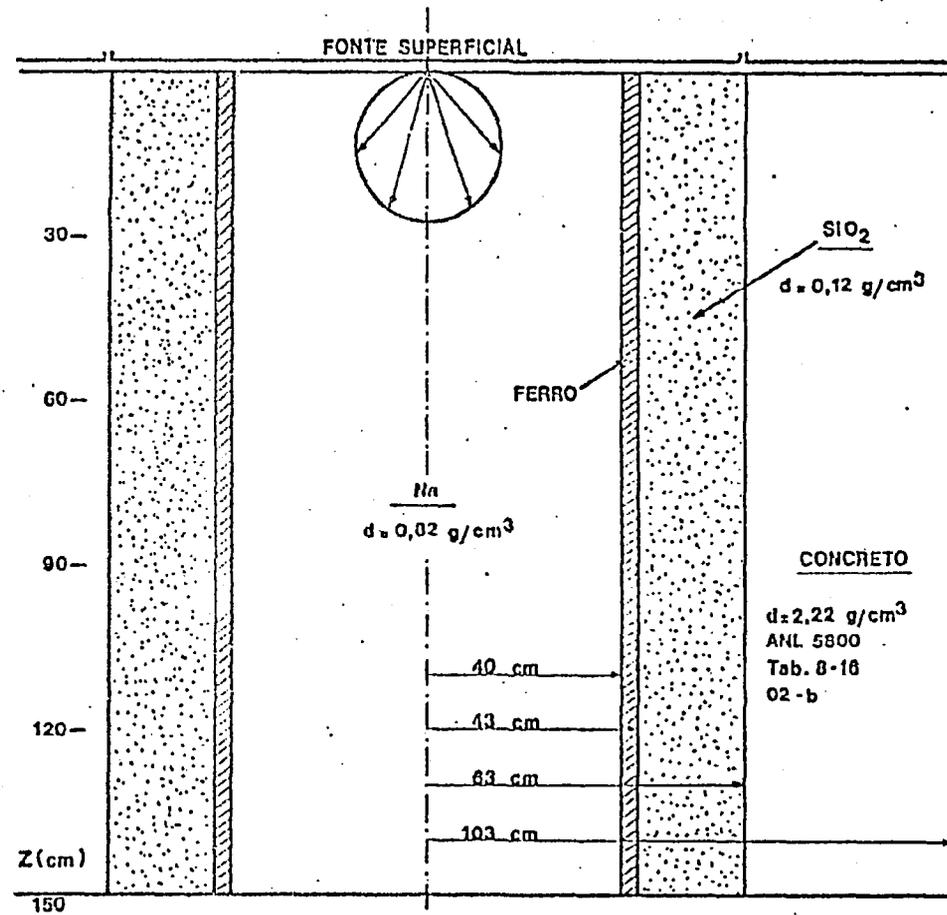


Fig. 6 - Geometria do canal refrigerante de sódio.

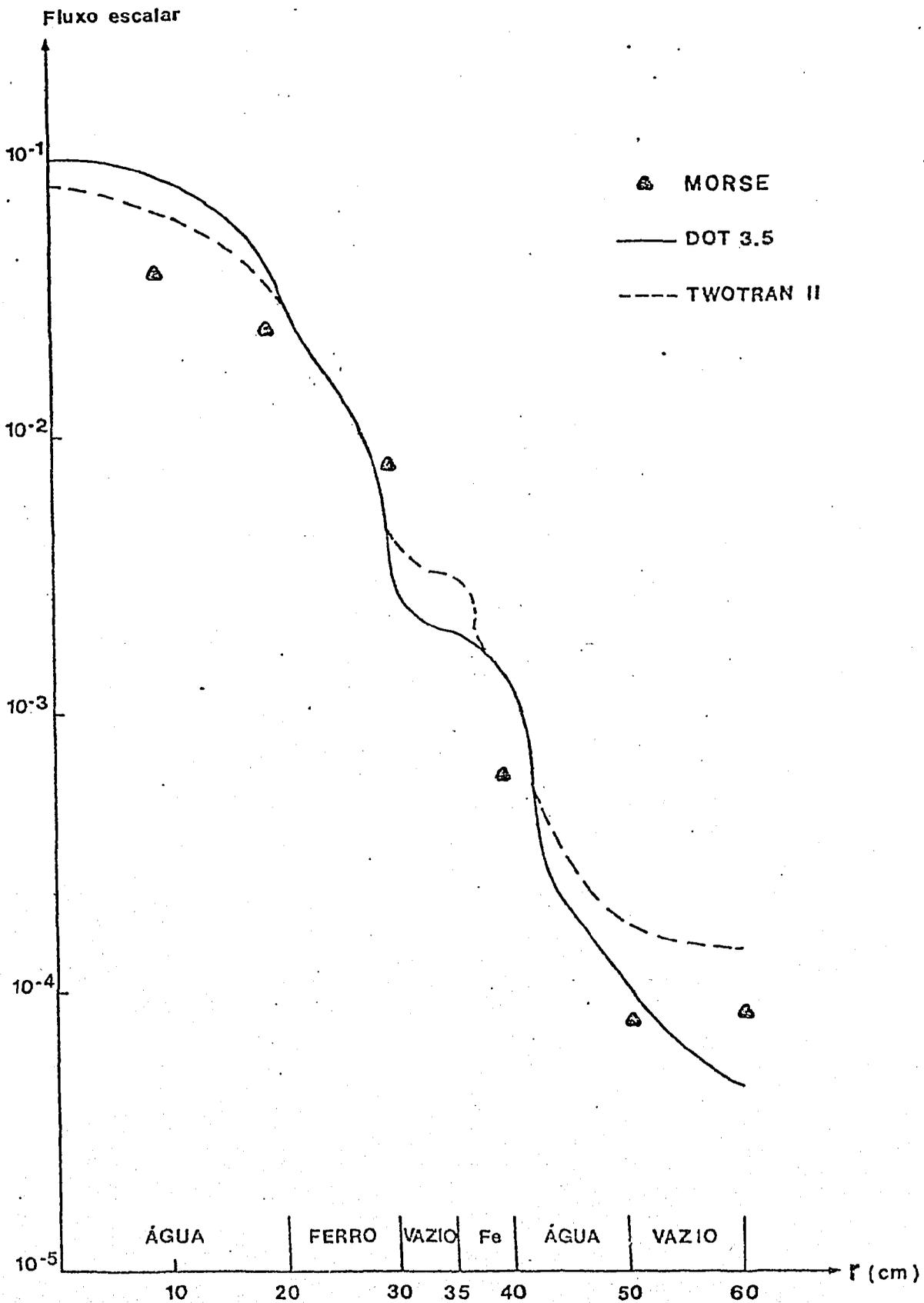


Fig. 7 - Fluxo escalar para o grupo 1, sobre a linha  $Z=37,5\text{cm}$ .

Tabela 3. - Fluxos escalares obtidos para o problema 2, grupo de energia 15, comparação de resultados obtidos (O) e publicados (P).

R Z		15,00	21,00	33,00	40,75
		18,50	P	9,75E-3	1,00E-2
	O	8,98E-3(10)	9,55E-3(15)	1,16E-2(24)	1,29E-2(36)
30,50	P	7,56E-3	7,58E-3	7,28E-3	6,04E-3
	O	6,22E-3(31)	5,54E-3(19)	4,89E-3(22)	* *
42,00	P	3,75E-3	3,71E-3	3,39E-3	2,99E-3
	O	3,28E-3(27)	3,31E-3(29)	2,95E-3(28)	2,27E-3(12)

### 5 - Conclusões

A característica principal de um código de Monte Carlo é de que o usuário não pode utilizá-lo como uma caixa negra. Há sempre necessidade de alguma programação e, isto significa a necessidade de conhecimentos de computação, linguagem de controle de sistemas e, principalmente um bom conhecimento sobre os métodos de Monte Carlo.

O código MORSE vem a cada dia incorporando novos módulos, rotinas e técnicas mais eficientes que o tornam também mais fácil de ser utilizado. Entretanto, as dificuldades ainda encontradas continuam a exigir pessoas bastante insistentes na obtenção de resultados.

O desenvolvimento contínuo de computadores maiores e mais rápidos aliado a uma maior difusão do método garantirão por um bom tempo a utilização cada vez mais extensiva do método Monte Carlo, não somente na engenharia nuclear como em outras áreas científicas.

## BIBLIOGRAFIA

- 1 - ASAOKA, T.; MIYASAKA, S.; FUJIMURA, T.; TSUTSUI, T.  
Benchmark test calculations with two-dimensional  
(r,z) radiation transport codes Newsletter, 22:  
5-13, 1977.
- 2 - CARTER, L.L. & CASHWELL, E.D. Particle transport  
simulation with the Monte Carlo method. Oak Ridge,  
Tnn., USERDA, 1975.
- 3 - COVEYOU, R.R.; CAIN, V.R.; YOST, K.J. Adjoint and  
importance in Monte Carlo application. Nuc.Sci.Eng.  
28: 376-383.1967.
- 4 - DEVILLERS, C. Experience on utilization of program  
ANISN. Newsletter, 17: 11-22, 1972.
- 5 - EMMET, M.B. The MORSE Monte Carlo radiation transport  
code system, Oak Ridge, Tnn., Oak Ridge Nat. Lab.  
1975 (ORNL-4972).
- 6 - MAIORINO, J.R.; MENDONÇA, A.G.; OTTO, A.C.; YAMAGUCHI, M.  
Metodologia de cálculo de blindagem de reatores nuclea  
res, 3º Encontro Nacional de Física de Reatores, pag.  
306-317, Itaipava - RJ, dez. 1982.
- 7 - METROPOLIS, N. & ULAM, S. The Monte Carlo method. J. Amer.  
Statistical Soc., 44 (247): 335-41, 1949, apud SHREIDER,  
Y.A. Method of statistical testing. Amsterdam Elsevier,  
1964, pag. 7.
- 8 - OTTO, A.C. & MAIORINO, J.R. Estudo e aplicação dos códigos  
ANISN e DOT 3.5 a problemas de blindagem de radiações nu  
cleares, São Paulo. IPEN, 1983 (Dissertação de Mestrado).
- 9 - SIMONS, G.L. (ed.) Shielding Denchmark Problems, Oak Ridge,  
Tnn., Oak Ridge Nat. Lab., 1974 (ORNL-RSIC-25).

- 10 - SCHMIDT, F.A.R. Status of the Monte Carlo development, Proceeding of a seminar, IAEA, Vienna, 17-24 jan, 1972.
- 11 - STRAKER, E.A. Deciphering the MORSE code, collected papers of a seminar, Oak Ridge Nat. Lab., Oak Ridge, oct. 5-7, 1970 (ORNL-RSIC-29).