

BR 9127 780
INIS- BR -- 2805

**INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

**ANÁLISE DE EXPERIMENTOS CRÍTICOS DE UO_2 - PuO_2 UTILIZANDO
OS SISTEMAS NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION .**

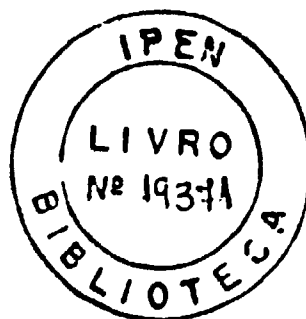
MARCO ANTONIO RODRIGUES FERNANDES

Dissertação apresentada como parte dos requisitos
para obtenção do grau de "Mestre na Área de
Concentração em Reatores Nucleares de Potência e
Tecnologia do Combustível Nuclear".

Orientador : Dr. Adimir dos Santos

São Paulo

1990



**Pensem nas crianças
Mudas telepáticas
Pensem nas meninas
Cegas inexatas
Pensem nas mulheres
Rotas alteradas
Pensem nas feridas
Como rosas cálidas
Mas oh não se esqueçam
Da rosa da rosa
Da rosa de Hiroxima
A rosa hereditária
A rosa radioativa
Estúpida e inválida
A rosa com cirrose
A anti-rosa atômica
Sem cor sem perfume
Sem rosa sem nada.**

Vinicius de Moraes

Dedico este trabalho :

À minha esposa "Mauricéia"

Ao meu filho "Marco Felipe"

À minha mãe "Alzira"

Ao meu pai "Agnelo" (in memoriam)

Ao meu irmão "Carlos" (in memoriam).

Aos quais serei eternamente grato.

AGRADECIMENTOS

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares da Comissão Nacional de Energia Nuclear (IPEN/CNEN-SP), pelo apoio material e suporte financeiro.

À Coordenadoria para Projetos Especiais (COPESP) do Ministério da Marinha (MM), pelo fornecimento das instalações e equipamentos utilizados neste trabalho.

Ao Prof. Dr. Adimir dos Santos, pela valiosa e dedicada orientação, além do inesgotável esforço tido ao longo de todo este trabalho, bem como pela compreensão e sincera amizade.

Em particular, e de forma bastante expressiva, ao grande amigo M.Sc. Alfredo Yuuitiro Abe, pela incansável ajuda e fundamental incentivo durante todo o decorrer deste trabalho.

Ao colega M.Sc. Mitsuo Yamaguchi, pela importante colaboração na elaboração e revisão do texto.

Ao Dr. Roberto David Martinez Garcia (Instituto de Estudos Avançados IEAv/CTA-Ministério da Aeronáutica), pelas sugestões e revisão do texto, bem como pela participação como membro da banca examinadora da defesa da dissertação.

Aos companheiros B.Sc. Gelson Toshio Otani, Lucia Estela Menegatti, Luiz A.L.

Amorim, Edilson Fernandes, Emilia Nakamura e Edna Maria Lopes, pelo apoio e colaboração na utilização dos sistemas computacionais CDC-CYBER e IBM-4381.

Aos colegas da pós-graduação Maurício Genta Maragni, Isa Melão, Angela Valulis Simões, Eduardo O. de Assumpção Filho (Pacheco), Cristina Sayuri, Willy Pendl Jr. e Cleber de Andrade, pela inesquecível convivência.

Aos companheiros M.Sc. Carlos Roberto Ferreira (Felis) e M.Sc. Leda Cristina C. B. Fanaro, pelo incentivo e permanente aconselhamento.

A todos os outros amigos do RT, especialmente, Dra. Nanami Kosaka, M.Sc. Luis A. Mai, M.Sc. Helio Yoriyaz, B.Sc. Miriam Medeiros da Silva, M.Sc. Gracieta Simões de A. Silva, M.Sc. Margaret de Almeida Damy, M.Sc. Arlindo Gilson Mendonça, B.Sc. Antonio Belchior Jr., B.Sc. Almir Fernandes, B.Sc. Marcos Roberto Rossini, e aqueles cujos nomes foram injustamente omitidos, pelas importantes críticas e saudável convivência ao longo destes anos.

Ao Dr. Luis Paulo Geraldo e Dr. Laércio Vinhas, professores da graduação, pela influência na escolha da energia nuclear para estudos de pós-graduação.

Aos professores da pós-graduação Dr. Antonio Rubens Brito de Castro (Unicamp) e Dr. Reynaldo Pugliesi (IPEN), pela conscientização da necessidade da energia nuclear, bem como de seu uso essencialmente pacífico.

Ao grande mestre e companheiro nas importantes decisões, Prof. Carlos Henrique dos Santos, pela inesgotável paciência e fundamental participação nesta formação.

ANÁLISE DE EXPERIMENTOS CRÍTICOS DE UO_2 - PuO_2 UTILIZANDO OS SISTEMAS NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION .

Marco Antonio Rodrigues Fernandes

RESUMO

O desempenho do sistema de computação HAMMER-TECHNION, em análise de experimentos críticos com células de UO_2 - PuO_2 revestidas por zircaloy-2 e moderadas a água leve, foi avaliado neste trabalho, utilizando os arquivos de dados nucleares básicos ENDF/B-IV e JENDL-2. Elaborou-se uma nova biblioteca térmica de dados nucleares, com estrutura de 36 grupos de energia e "cut-off" em 1,855 eV, e uma nova versão para o sistema HAMMER-TECHNION, compatível com esta estrutura de grupos de energia térmica, foi implantada. O efeito do "cut-off" térmico, no cálculo dos parâmetros celulares e secções de choque colapsadas em poucos grupos, pôde então ser analisado. Resultados finais para o fator de multiplicação efetivo (k_{ef}) foram obtidos com o código CITATION, utilizando as secções de choque homogeneizadas e colapsadas em 4 grupos de energia calculadas com o sistema HAMMER-TECHNION, com os dois "cut-off" térmicos estudados. Para algumas células de interesse, a autoblindagem e os efeitos da interferência entre ressonâncias dos isótopos do plutônio e urânio foram tratados pelo módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. O impacto do novo "cut-off" não apontou nenhum efeito extremamente relevante no valor de k_{ef} .

UO₂-PuO₂ CRITICAL EXPERIMENT ANALYSIS BASED ON A COUPLED NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION SYSTEM .

Marco Antonio Rodrigues Fernandes

ABSTRACT

The performance of the HAMMER-TECHNION system in the criticality analysis of mixed oxide (UO₂-PuO₂) fuel pins clad with Zircaloy-2 and having light water as moderator was analysed in this work. The basic nuclear data libraries for the HAMMER-TECHNION have been generated by processing the ENDF/B-IV and JENDL-2 nuclear data files with the NJOY system. The question of the effect of Plutonium resonances close to the thermal region on the average thermal parameters was addressed by creating a special version of the HAMMER-TECHNION system with the thermal energy cut-off at 1.855 eV. The final system effective multiplication factor was calculated with the CITATION code by using the homogenized four-group cross sections generated by the HAMMER-TECHNION system. Results are shown for the original HAMMER-TECHNION thermal "cut-off" and for the one at 1.855 eV. Besides that, for some selected critical systems, the effect of the resonance interference among the resonances of the Uranium and Plutonium isotopes was addressed by using the ROLAIDS module of the AMPX-II system. The effect of the thermal energy cut-off on the integral parameters of the critical systems was not found to be of extreme importance.

ÍNDICE

	Pag.
CAPÍTULO 1 : INTRODUÇÃO	1
1.1 Considerações gerais	1
1.2 Justificativa e objetivos do trabalho	8
CAPÍTULO 2 : DESCRIÇÃO DOS EXPERIMENTOS ANALISADOS	11
2.1 Células de $UO_2-2\%PuO_2$	12
2.2 Células de $UO_2-4\%PuO_2$	17
2.3 Células de $UO_2-6,6\%PuO_2$	20
CAPÍTULO 3 : METODOLOGIA DO TRABALHO	23
3.1 Procedimento para obtenção da biblioteca térmica	25
3.2 Procedimento para obtenção da biblioteca rápida	30
3.3 Principais parâmetros celulares integrais analisados com o HAMMER-TECHNION	31
3.3.1 O fator de multiplicação efetivo (k_{ef})	32
3.3.2 O fator de multiplicação infinito (k_{inf})	36
3.3.3 Número médio de nêutrons produzidos por fissão por nêutron térmico absorvido no combustível (η)	39
3.3.4 Fator de utilização térmica da célula (f)	41
3.3.5 Probabilidade de escape à ressonância (p)	44
3.3.6 Razão entre a captura de nêutrons epitérmica e térmica para o U-238 ($R-28$)	46

3.3.7	Razão entre as fissões rápida e térmica do U-235 (D-25)	48
3.3.8	Razão entre a fissão do U-238 e a fissão do U-235 (D-28)	49
3.3.9	Razão de conversão (CON)	50
3.4	Parâmetros celulares homogeneizados e colapsados em poucos grupos	51
3.4.1	Secção de choque remoção (Σ_r)	52
3.4.2	Coefficiente de difusão (D)	54
3.4.3	Secção de choque de absorção (Σ_a)	58
3.4.4	Secção de choque de fissão (Σ_f)	60
CAPÍTULO 4 : FUNDAMENTOS TEÓRICOS		65
4.1	Isótopos do urânio	65
4.1.1	Urânio-234	65
4.1.2	Urânio-235	67
4.1.3	Urânio-238	68
4.2	Isótopos do plutônio	70
4.2.1	Plutônio-239	70
4.2.2	Plutônio-240	71
4.2.3	Plutônio-241	73
4.2.4	Plutônio-242	74
4.3	Isótopos do amerício	75
4.3.1	Amerício-241	76

4.4	Implicações nos parâmetros celulares térmicos devido às características físicas dos isótopos do plutônio	77
CAPÍTULO 5 : RESULTADOS OBTIDOS		85
5.1	Fator de multiplicação de nêutrons	87
5.2	Parâmetros celulares integrais	98
5.3	Parâmetros celulares homogeneizados e colapsados em 4 grupos de energia	125
5.4	Tempo de computação gasto no processamento do sistema HAMMER-TECHNION	137
5.5	Resultados obtidos com o programa CITATION	141
5.6	Resultados obtidos com o programa LASER	148
CAPÍTULO 6 : RESULTADOS COM AUTOBLINDAGEM VIA ROLAIDS		152
6.1	Célula unitária com 3 regiões	153
6.2	Célula unitária com 12 regiões	158
CAPÍTULO 7 : CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES		163
APÊNDICE A – Apresentação do sistema HAMMER-TECHNION		166
A.1 – Descrição do código HAMMER-TECHNION		166
A.2 – Desenvolvimento do THERMOS		170
A.2.1 – A equação integral de transporte		170
A.2.2 – O "kernel" de transporte		172
A.3 – O método de Carlvik		173

A.4 – Desenvolvimento do HAMLET	177
A.4.1 – A aproximação B1	178
A.4.2 – A aproximação P1	179
A.4.3 – Modelos de cálculo da moderação de nêutrons	181
A.5 – O tratamento das ressonâncias	183
APÊNDICE B : Execução do HAMMER-TECHNION	189
B.1 Cartões de entrada do H-TEC	193
APÊNDICE C – Estruturas de grupos de energia das bibliotecas básicas do sistema HAMMER-TECHNION	201
APÊNDICE D – Metodologia de cálculo do LASER	204
APÊNDICE E – O programa CITATION	211
APÊNDICE F – O sistema acoplado NJOY – AMPX-II	217
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	222

ÍNDICE DAS FIGURAS

N^o	TÍTULO	Pag.
2.1.1	Arranjo das células com varetas combustíveis de $UO_2-2\%PuO_2$ e $UO_2-4\%PuO_2$.	13
2.1.2	Especificação das varetas combustíveis de $UO_2-2\%PuO_2$.	13
2.2.1	Especificação da vareta combustível de $UO_2-2\%PuO_2$	18
3.3.1.1	k-efetivo em função do "buckling" via H-TEC - células de $UO_2-2\%PuO_2$ (8%,16% e 24% de Pu-240)	34
3.3.1.2	k-efetivo em função do "buckling" via H-TEC - células de $UO_2-4\%PuO_2$ (18% de Pu-240)	34
3.3.1.3	k-efetivo em função do "buckling" via CITATION e HFN - células de $UO_2-2\%PuO_2$ (8%Pu-240)	35
3.3.2.1	k-inf, η , p e f em função da razão de moderação células de $UO_2-2\%PuO_2$ (8%Pu-240)	37
3.3.2.2	k-inf, η , p e f em função da razão de moderação células de $UO_2-2\%PuO_2$ (16%Pu-240)	37
3.3.2.3	k-inf, η , p e f em função da razão de moderação células de $UO_2-2\%PuO_2$ (24%Pu-240)	38
3.3.2.4	k-inf, η , p e f em função da razão de moderação células de $UO_2-4\%PuO_2$ (18%Pu-240)	38
3.3.2.5	k-inf, η , p e f em função da razão de moderação células de $UO_2-6,6\%PuO_2$ (8,57%Pu-240)	39
4.1.1	Secções de choque pontuais X energia : U-234	66
4.1.2	Secções de choque pontuais X energia: U-235	67

4.1.3	Secções de choque pontuais X energia: U-238	69
4.2.1	Secções de choque pontuais X energia: Pu-239	71
4.2.2	Secções de choque pontuais X energia: Pu-240	72
4.2.3	Secções de choque pontuais X energia: Pu-241	73
4.2.4	Secções de choque pontuais X energia: Pu-242	75
4.3.1	Secções de choque pontuais X energia: Am-241	76
4.4.1	Espectro de nêutrons térmicos X energia – casos: A3 com "cut-off"=1,855 eV e A3 c/ "c-off"=0,625eV	78
4.4.2	Espectro de nêutrons térmicos X energia – casos: C3 com "cut-off"=1,855 eV e C3 c/ "c-off"=0,625eV	78
4.4.3	Espectro de nêutrons térmicos X energia – casos: D3 com "cut-off"=1,855 eV e D3 c/ "c-off"=0,625eV	79
4.4.4	Espectro de nêutrons térmicos X energia – casos: E1, E3 e E5 com "cut-off"=0,625eV	79
4.4.5	Secção de choque de fissão X energia	81
4.4.6	Secção de choque de captura (n,gama) X energia	82
4.4.7	Razão entre a secção de choque de captura e a sec de choque de fissão (α): U ²³⁵ , Pu ²³⁹ e Pu ²⁴¹	83
5.5.1	k-efetivo X "pitch"-células UO ₂ -2%PuO ₂ (8%Pu-240)	145
5.5.2	k-efetivo X "pitch"-células UO ₂ -2%PuO ₂ (16%Pu-240)	146
5.5.3	k-efetivo X "pitch"-células UO ₂ -2%PuO ₂ (24%Pu-240)	146
5.5.4	k-efetivo X "pitch"-células UO ₂ -4%PuO ₂ (18%Pu-240)	147
6.1.1	Secção de choque de captura do Pu-240 X energia em multigrupo via NJOY e via ROLAIDS para caso A1	155
6.1.2	Secção de choque de fissão do U-235 X energia em multigrupo via NJOY e via ROLAIDS para caso A1	155
6.1.3	Secção de choque de fissão do Pu-240 X energia	

	em multigrupo via NJOY e via ROLAIDS para caso A1	156
6.1.4	Secção de choque de captura do U-235 X energia em multigrupo via NJOY e via ROLAIDS para caso A1	156
6.1.5	Secção de choque de fissão do Pu-239 e Pu-241 X energia via NJOY e via ROLAIDS para caso A1	157
B.1	Diagrama de blocos das subrotinas que inicializam a execução do H-TEC	189
B.2	Diagrama de blocos das subrotinas que definem o arranjo celular	190
B.3	Diagrama de blocos das subrotinas utilizadas no programa Thermos	191
B.4	Diagrama de blocos das subrotinas utilizadas na região de energias epitérmicas e rápidas	192
B.5	Diagrama de blocos das subrotinas que finalizam a execução do H-TEC	192
F.1	Diagrama de módulos executáveis do sistema acoplado NJOY - AMPX-II	221

ÍNDICE DAS TABELAS

<u>No</u>	<u>TÍTULO</u>	<u>Pag.</u>
2.1.1	Características das células com combustível de $UO_2-2\%PuO_2$.	14
2.1.2	Concentrações atômicas do combustível $UO_2-2\%PuO_2$.	15
2.1.3	Composição isotópica do plutônio ($UO_2-2\%PuO_2$).	15
2.1.4	Concentrações atômicas calculadas para $UO_2-2\%PuO_2$	17
2.2.1	Características das células com combustível de $UO_2-4\%PuO_2$.	19
2.2.2	Concentrações atômicas do combustível $UO_2-4\%PuO_2$.	19
2.2.3	Composição isotópica do plutônio ($UO_2-4\%PuO_2$).	19
2.3.1	Características das células com combustível de $UO_2-6,6\%PuO_2$.	20
2.3.2	Concentrações atômicas – combustível $UO_2-6,6\%PuO_2$	21
2.3.3	Composição isotópica do plutônio ($UO_2-6,6\%PuO_2$).	21
3.1	Valores calculados de k_{eff} com os códigos HAMMER e H-TEC para os casos A, B e C ($UO_2-2\%PuO_2$)	24
3.1.1	Limites de velocidade $V(i)$ e incrementos $\Delta V(i)$ dos grupos de energias térmicas.	27
3.1.2	Características dos nuclídeos usados no LITHE: biblioteca térmica via ENDF/B-IV \rightarrow NJOY/AMPX-II.	28
3.1.3	Características dos nuclídeos usados no LITHE: biblioteca térmica via JENDL-2 \rightarrow NJOY/AMPX-II.	29
3.3.3.1	Valores de η – células com 2% de PuO_2 .	40

3.3.3.2	Valores de η – células com 4 e 6,6% de PuO_2 .	40
3.3.4.1	Valores da fração de absorção na região do combustível – células com 2% de PuO_2 .	43
3.3.4.2	Valores da fração de absorção na região do combustível – células com 4 e 6,6% de PuO_2 .	43
3.3.5.1	Valores calculados da probabilidade de escape à ressonância – casos: A1, C1, D1 e E1.	45
3.3.5.2	Influência no valor de p devido ao "buckling".	46
3.3.6.1	Fluxo de nêutrons e secções de choque do U-238 colapsados em 4 macrogrupos para cálculo do R-28.	47
3.3.7.1	Secção de choque de fissão macroscópica do U-235 homogeneizada e colapsada no macrogrupo I.	49
3.4.1.1	Grandezas envolvidas no cálculo de Σ_r (4% PuC_2).	54
3.4.2.1	Fluxo e corrente de nêutrons – faixas de energia epitérmica e rápida—caso com UO_2 -2% PuO_2 (8% Pu240).	57
3.4.2.2	Coefficiente de difusão – célula : caso A1.	58
3.4.4.1	Parâmetros homogeneizados por região e colapsados em 4 macrogrupos – célula : caso A1.	62
5.1.1	Valores de k_{ef} via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	89
5.1.2	Valores de k_{ef} via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	92
5.1.3	Valores de k_{ef} via H-TEC – célula: UO_2 -6,6% PuO_2 .	92
5.1.4	Valores de k_{ef} calculados com o HRG3 e H-TEC.	93
5.1.5	Valores de k_{inf} via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	95
5.1.6	Valores de k_{inf} via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	96
5.1.7	Valores de k_{inf} via H-TEC—células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	96
5.2.1	Valores de η via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	100

5.2.2	Valores de η via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	101
5.2.3	Valores de η via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	102
5.2.4	Valores de f via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	104
5.2.5	Valores de f via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	105
5.2.6	Valores de f via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	106
5.2.7	Valores de p via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	108
5.2.8	Valores de p via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	109
5.2.9	Valores de p via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	109
5.2.10	Valores de R-28 via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	111
5.2.11	Valores de R-28 via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	112
5.2.12	Valores de R-28 via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	113
5.2.13	Valores de D-25 via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	115
5.2.14	Valores de D-25 via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	116
5.2.15	Valores de D-25 via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	116
5.2.16	Valores de D-28 via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	118
5.2.17	Valores de D-28 via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	119
5.2.18	Valores de D-28 via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	119
5.2.19	Valores de CON via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	122
5.2.20	Valores de CON via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	123
5.2.21	Valores de CON via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	123
5.2.22	Parâmetros celulares integrais referência/ 73 /	125
5.3.1	Valores de D_{th} via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	128
5.3.2	Valores de D_{th} via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	129
5.3.3	Valores de D_{th} via H-TEC – células: UO_2 -6,6% PuO_2 .	129
5.3.4	Valores de $\Sigma_{a, th}$ via H-TEC – células: UO_2 -2% PuO_2 .	131
5.3.5	Valores de $\Sigma_{a, th}$ via H-TEC – células: UO_2 -4% PuO_2 .	132

5.3.6	Valores de $\Sigma_{a,th}$ via H-TEC – células: $UO_2-6,6\%PuO_2$.	132
5.3.7	Valores de $\nu\Sigma_{f,th}$ via H-TEC – células: $UO_2-2\%PuO_2$.	134
5.3.8	Valores de $\nu\Sigma_{f,th}$ via H-TEC – células: $UO_2-4\%PuO_2$.	135
5.3.9	Valores de $\nu\Sigma_{f,th}$ via H-TEC – células: $UO_2-6,6\%PuO_2$.	135
5.4.1	Tempo de execução do H-TEC – células: $UO_2-2\%PuO_2$.	138
5.4.2	Tempo de execução do H-TEC – células: $UO_2-4\%PuO_2$.	139
5.4.3	Tempo de execução do H-TEC – células: $UO_2-6,6\%PuO_2$.	139
5.5.1	Valores de k_{ef} via CITATION – células: $UO_2-2\%PuO_2$.	142
5.5.2	Valores de k_{ef} via CITATION – células: $UO_2-4\%PuO_2$.	143
5.5.3	Valores de k_{ef} via CITATION – células: $UO_2-6,6\%PuO_2$.	143
5.6.1	k_{ef} e k_{inf} via LASER – células: $UO_2-2\%PuO_2$.	149
5.6.2	k_{ef} e k_{inf} via LASER – células: $UO_2-4\%PuO_2$.	150
5.6.3	k_{ef} e k_{inf} via LASER – células: $UO_2-6,6\%PuO_2$.	150
6.1.1	k_{ef} obtido após pré-processamento do ROLAIDS.	154
6.2.1	Séries de dados nucleares utilizados no ROLAIDS.	158
6.2.2	Valores do fator de auto-blindagem (grupo 44).	160
6.2.3	Secções de choque calculadas à diluição infinita.	160
6.2.4	Valores de k_{inf} via ROLAIDS/HAMMER-TECHNION.	161
6.2.5	Valores de k_{ef} via ROLAIDS/H-TEC/CITATION.	162
B.1.1	Parâmetros celulares homogeneizados e colapsados em 4 grupos – verificação dos "break-points".	197
B.1.2	Parâmetros celulares homogeneizados e colapsados em 4 grupos – verificação do "cut-off".	198
C.1	Estruturas de grupos na faixa de energia térmica.	202
C.2	Estrutura de grupos de energia não térmica.	203
E.1	Representação dos "mesh-points" no CITATION.	211

CAPITULO 1 : INTRODUÇÃO

1.1 – Considerações Gerais :

Os resultados da utilização dos dados das bibliotecas ENDF/B-IV e JENDL-2 em códigos de análise de reatores dependem da qualidade das secções de choque básicas e das aproximações físicas fundamentais usadas para o cálculo do fluxo de nêutrons dependente do espaço, para a autoblindagem das ressonâncias, para a colapso das secções de choque e homogeneização da célula. Assim sendo, é preciso verificar a validade dessas aproximações nos cálculos celulares, pois algumas vezes, os dados de secções de choque, contidos nas bibliotecas básicas de dados nucleares, são responsabilizados por problemas que são mais propriamente atribuídos a infelizes aproximações nos métodos de cálculo. Isto envolve, em primeira instância, estabelecer a validade da teoria de cálculo neutrônico utilizada pelos códigos, quer seja a equação integral de transporte de nêutrons ou a teoria de difusão de nêutrons, e em segundo lugar, verificar a exatidão das aproximações físicas nos arranjos de células unitárias consideradas nos códigos de análise celular.

Neste trabalho, os experimentos críticos utilizados, descritos na seção 2.1, caracterizam-se por redes de células unitárias ("lattice") compostas de varetas combustíveis de UO_2 - PuO_2 . O material usado como revestimento ("cladding") é o zircaloy-2 e o moderador a água leve. Para cada "lattice" estudou-se diferentes razões de moderação e concentrações do isótopo Pu-240 no óxido de plutônio.

Verificou-se interesse neste tipo de estudo nos grandes laboratórios e institutos de pesquisa nas áreas da energia nuclear. Nas referências / 22 /, / 23 /, / 48 /, / 65 /, / 66 /, / 73 /, / 75 /, / 77 /, / 81 /, / 84 /, / 94 /, encontra-se um sumário sobre alguns tipos desse experimento e programas de pesquisa desenvolvidos com a finalidade de um

aperfeiçoamento tecnológico seguro e determinação confiável das propriedades físicas dos reatores com combustíveis do tipo UO_2 - PuO_2 . Outro grande interesse no estudo destes tipos de combustível nuclear é a reutilização do plutônio, além de propiciar uma melhor utilização das reservas de urânio, como é a filosofia dos projetos de LWHR (light water converter reactor). Além disso, a reciclagem do plutônio nos PWRs possibilita uma redução dos fatores de risco / 51 / no armazenamento do combustível nuclear irradiado.

Vários códigos computacionais têm sido adaptados, modificados ou apropriados para serem usados nesses sistemas físicos. Estudos teóricos têm sido dirigidos a fim de desenvolver modelos matemáticos que prevêm perfeitamente o comportamento físico dos sistemas de reatores nucleares. Uma medida da validade do modelo matemático é obtida comparando os parâmetros integrais calculados e os medidos, tal como o fator de multiplicação efetivo do reator.

Em geral, os códigos celulares disponíveis são, na realidade, combinações de programas independentes como o THERMOS / 37 /, para cálculos na região de energias térmicas do neutron e o MUFT / 10 /, para as energias epitérmicas e rápidas, e métodos para cálculos de termalização, como o de Wigner-Wilkins / 92 /, e procedimentos para o tratamento conveniente das autoblindagens das ressonâncias como o método de Nordheim / 55 / ou o de Bondarenko / 11 /. Esses programas e métodos combinados podem formar um sistema computacional adequado para a análise celular.

Alguns códigos usados para análise de experimentos celulares, exceto aqueles que foram objeto deste trabalho, pois estes são apresentados nos Apêndices ao final deste texto, são brevemente descritos abaixo :

EPRI-CELL (E-C) / 79 / - É um código integrante do ARMP (EPRI - Advanced Recycle Methodology Program), comumente usado para produzir constantes homogeneizadas e colapsadas em poucos grupos de energia, para subsequente utilização em cálculos de difusão, como os desenvolvidos pelo programa PDQ, também integrante

do ARMP. A região de energia térmica é tratada com uma versão modificada do programa THERMOS, utilizando uma energia de corte térmica situada em 1,855 eV, e os cálculos na faixa de energia epitérmica são realizados com o programa GAM, implementado para cálculo das autoblindagens das ressonâncias e transmutação com uma versão do CINDER.

SPEKTRA / 56 / - código para cálculos celulares, especialmente usado para reatores APWR; utiliza a técnica de probabilidades de colisão para determinar o fluxo neutrônico e constantes macroscópicas de grupo na célula cilindrizada composta por duas regiões, uma contendo o combustível, e a outra, rodeando este, composta de uma mistura homogênea de moderador e revestimento. Possui uma estrutura de 35 grupos de energia; às energias acima de 0,215 eV (25º grupo), o tratamento é feito pelo método de Bondarenko; a faixa de energias térmicas (0,0001 a 0,215 eV) é dividida em dez grupos com intervalo de letargia constante. Um grupo de rotinas de colapso fornece as constantes celulares em quatro grupos, as quais são subsequentemente utilizadas no programa DIBU-1, que realiza cálculos de queima espacial usando teoria de difusão unidimensional em geometria cilíndrica, resolvendo a equação de difusão em multigrupos de energia pelo método de diferenças finitas, e considerando a fuga na direção axial simulada pelo "buckling" axial.

ERG3 / 88 / - código usado para análise celular através da teoria de transporte em multigrupos de energia. Na região de moderação, o código calcula o espectro de nêutrons epitérmico e rápido num sistema homogeneizado (a célula é considerada uma mistura homogênea de combustível, revestimento e moderador), resolvendo a equação de Boltzmann independente do tempo com fontes isotrópicas usando a aproximação P1 ou B1. O intervalo de energia de 0,414 eV a 10 MeV é dividido em 68 grupos. A integral de ressonância é calculada com uma modificação do método de Adler, Hinman e Nordheim. Um método descrito por Carlvik trata a heterogeneidade na região de ressonância, isto é, o sombreamento causado pelas varetas vizinhas.

BRT-I / 88 / - calcula a distribuição dos nêutrons térmicos no espaço e energia

para uma célula unitária cilíndrica composta de três regiões: combustível, encamisamento e moderador. O intervalo de energia térmica, de 0 a 0,683 eV, é dividido em 30 grupos. O "kernel" de espalhamento usado para a água é baseado no modelo de Nelkin; para os outros materiais usa-se o modelo de Brown-St John. O desenvolvimento dos cálculos realizados neste código é semelhante ao do programa THERMOS usado no sistema HAMMER-TECHNION / 5 /.

LEOPARD / 6 / - (Lifetime Evaluating Operations Pertinent to the Analysis of Reactor Designs) - este código divide o espectro de energia dos nêutrons em duas faixas, térmica e rápida. A faixa térmica compreende os nêutrons de energia até 0,625 eV e é discretizada em 172 pontos de energia; já a faixa rápida que corresponde aos nêutrons de energias entre 0,625 eV e 10 Mev é discretizada em 54 grupos de energia. Na parte térmica faz-se a homogeneização da célula heterogênea e determina-se os parâmetros efetivos da célula homogeneizada. Aqui, a heterogeneidade da célula real é considerada pelo fator de desvantagem térmico definido como a relação entre o fluxo médio em cada região e o fluxo médio na região do combustível. Este fator é calculado usando o método A.B.H. / 2 /. Após este passo, determina-se o fluxo de nêutrons térmicos pelo método de Wigner-Wilkins ou pelo método de Nelkin implementado no LEOPARD / 49 /. Este fluxo neutrônico é usado para o cálculo das secções de choque térmicas médias. Na região de energia rápida a equação de transporte é resolvida utilizando a aproximação B1 e os métodos de Selengut-Goertzel e Greuling-Goertzel, detalhados no Apêndice A deste trabalho. Após serem feitos todos os cálculos nas duas faixas de energia, rápida e térmica, os 172 pontos de energia térmica são condensados num único macrogrupo térmico e os 54 microgrupos rápidos são condensados em 3 macrogrupos rápidos. Esta nova estrutura condensada é usada para determinar o fator de multiplicação e a reatividade do reator, cujo comportamento é simulado pelo LEOPARD.

APOLLO / 35 / - permite calcular o fluxo, adjunto ou direto, em energia e espaço,

em um meio unidimensional, resolvendo a equação de transporte integral com a aproximação de multigrupo, calculando as propriedades neutrônicas de uma célula ou de um grupo de células do reator, em geometria cilíndrica, esférica ou plana. O código utiliza as aproximações de espalhamento isotrópico, correção de transporte e espalhamento linearmente anisotrópico (método B1). Para o tratamento espacial, este código utiliza o método das probabilidades de colisão, usando o termo de fuga DB^2 para considerar as fugas de nêutrons da célula. O APOLLO possui duas estruturas de multigrupos de energia distintas que podem ser escolhidas pelo usuário conforme sua aplicação. Uma estrutura de 186 grupos cobrindo as energias de $1,15444E-04$ eV a 10 MeV, a faixa de energia rápida, compreendida entre 2,53 eV e 10 MeV, é dividida em 26 grupos espaçados de 0,2 unidade de letargia, 99 grupos espaçados de 0,1 unidade de letargia e 1 grupo espaçado de 0,08998 unidade de letargia, a faixa de energia térmica, tratada pelo programa THERMOS, é dividida em 60 grupos cobrindo 9,99493 unidade de letargia entre 2,53 eV e $1,1544E-04$ eV. A outra estrutura de multigrupo opcional possui 99 grupos cobrindo as energias de $1,10E-04$ eV a 10 MeV, sendo a faixa rápida de energias dividida em 52 grupos varrendo de 2,76792 eV a 10 MeV e a faixa térmica de energias entre $1,10E-04$ a 2,76792 eV, dividida em 47 grupos.

WIMS / 4 / - (Winfrith Improved Multi-group Scheme) - desenvolvido para realizar cálculos de arranjos celulares de reatores térmicos. O código fornece como saída as taxas de reação e auto-valores, bem como as constantes celulares homogeneizadas. Sua biblioteca básica possui 14 grupos de energia rápida (acima de 9,118 keV), 13 grupos na região de energia de ressonância (4 eV a 9,118 keV), e 42 grupos térmicos (abaixo de 4 eV). Para os principais moderadores, o código oferece uma variedade de leis de espalhamento de nêutrons térmicos dependente da temperatura. O tratamento das ressonâncias é baseado nos teoremas de equivalência. O espectro de nêutrons é dado para os 69 grupos de energia usando o procedimento da teoria de colisões. O espectro calculado é então usado para condensação das secções de choque em um número de grupos desejado para a solução da

equação de transporte em geometria detalhada. Esta equação de transporte pode ser solucionada pelo método DSN de Carlson ou pelos métodos das probabilidades de colisão. Cálculos de fuga podem ser realizados com a teoria de difusão ou aproximação B1 mais elaborada.

ANISN / 27 / – resolve a equação de transporte linear de Boltzmann em geometria cilíndrica, esférica ou plana, usando o método de ordenadas discretas avançado desenvolvido por Carlson para a teoria de transporte de nêutrons. A estrutura de multigrupos de energia tratada no ANISN é uma opção do usuário, que deverá gerar sua biblioteca de dados nucleares com o número de grupos que desejar. Quando usado para cálculos celulares, este código pode gerar seções de choque macroscópicas homogêneas e colapsadas em quatro grupos de energia, para posterior uso em cálculos de difusão, como no CITATION.

DTF-IV / 88 / – calcula a distribuição do fluxo neutrônico usando a equação de transporte de Boltzmann pelo método das ordenadas discretas. A forma de multigrupo da equação de transporte com espalhamento anisotrópico é resolvida em geometria esférica, cilíndrica ou plana unidimensional. A ordem de quadratura do espalhamento anisotrópico é variável de entrada a qual é selecionada pelo usuário. O código permite um grande número de grupos de energia e pontos espaciais. A fuga de nêutrons nas direções perpendiculares é considerada pelo termo de fuga DB^2 . A execução deste código serve como parâmetro para avaliação dos efeitos da negligência da anisotropia nos códigos de difusão como o HFN ou CITATION.

LATREP / 59 / – executa cálculos celulares resolvendo a equação de difusão de nêutrons em dois grupos de energia, sendo uma equação para o grupo térmico compreendendo todas as energias abaixo de 0,625 eV, e a outra equação para um grupo rápido, o qual abrange toda a faixa de energia acima desta energia de corte. Neste último tem-se, além das seções de choque necessárias para o cálculo do fluxo de nêutrons, as

taxas de reações na ressonância para os núclídeos tratados. A teoria da probabilidade de colisão é usada para determinar a difusão dos nêutrons através das subzonas da célula.

HFN / 88 / - usa a teoria de difusão em multigrupo de energia dos nêutrons, resolvendo uma equação unidimensional para sistemas homogêneos ou não homogêneos, multiplicativos ou não. O intervalo de energia é dividido no máximo em 18 grupos e a distribuição espacial no máximo em 50 regiões homogêneas. A fuga de nêutrons nas direções transversais é considerada. Para um sistema multiplicativo, a execução deste código fornece a solução do fluxo direto com o correspondente auto-valor.

1.2 – Justificativa e Objetivos do Trabalho :

Os objetivos deste trabalho são enumerados com segue :

- 1) Estudar o efeito do "cut-off" térmico no sistema HAMMER-TECHNION / 5 /.
- 2) Analisar os experimentos críticos de UO_2 - PuO_2 disponíveis na literatura, visando testar o desempenho do sistema HAMMER-TECHNION.
- 3) Validar a biblioteca de dados nucleares para o sistema HAMMER-TECHNION processada com o sistema acoplado NJOY - AMPX-II / 70 /.

Com base nos objetivos acima citados, primeiramente estudou-se os métodos de cálculo tratados nas rotinas do sistema HAMMER / 82 /; em seguida pesquisou-se os trabalhos realizados com alguns arranjos celulares críticos ("critical benchmarks") de interesse. Ateve-se às células de UO_2 - PuO_2 , pois era de interesse inicial a verificação do comportamento do sistema HAMMER em elementos combustíveis que contenham isótopos do plutônio, uma vez que este tipo de estudo já havia sido realizado para as células tradicionais de UO_2 / 69 /, onde o código HAMMER, na sua versão mais atual, o HAMMER-TECHNION, demonstrou-se um excelente instrumento de trabalho para a análise celular com este tipo de vareta combustível. Entretanto, devido às fortes ressonâncias próximas à região de energias térmicas percebidas nas secções de choque dos isótopos de plutônio, o espectro de nêutrons calculado com o código HAMMER-TECHNION para sistemas de UO_2 - PuO_2 é diferente do espectro de nêutrons apresentado para sistemas que contenham apenas UO_2 . Próximo às energias de ressonância, o espectro neutrônico apresenta uma depressão característica, e tal efeito não é levado em consideração na região térmica, devido à energia de corte térmica

cut-off") usada neste código estar fora do alcance dessas ressonâncias. Este efeito, mascarado no código HAMMER-TECHNION, deve provocar, em princípio, uma discrepância entre os resultados experimentais e os calculados nos experimentos críticos.

Os sistemas celulares críticos selecionados foram então executados com o código HAMMER e com sua versão implementada em Israel, o HAMMER-TECHNION, verificando os resultados obtidos com as várias opções de cálculos proporcionadas por este último. Em seguida, procedeu-se à elaboração de uma biblioteca térmica composta pelos núcleos existentes nas células estudadas. Os resultados obtidos para os parâmetros celulares calculados com o HAMMER-TECHNION com as duas bibliotecas térmicas, a original gerada via FLANGE-II / 38 /, e esta, via NJOY-AMPX-II, são comparados no capítulo 3 deste trabalho.

A fim de se verificar o efeito do "cut-off" térmico nos cálculos de experimentos críticos, elaborou-se uma nova biblioteca de seções de choque térmicas, novamente utilizando-se o sistema acoplado NJOY - AMPX-II, com uma estrutura de 36 grupos de energia e energia de corte térmica de 1,855 eV. Os problemas selecionados foram novamente executados, agora com esta nova biblioteca térmica. Os resultados tais como os parâmetros integrais celulares e as constantes de grupo homogeneizadas, são apresentados no capítulo 5 deste trabalho, onde se compara os valores destes parâmetros obtidos com as duas energias de corte térmicas do HAMMER-TECHNION estudadas, e com as duas opções de cálculo do espectro térmico, o método de Carlvik e o método padrão do sistema HAMMER ("standard Thermos"). Também são apresentados, nas seções 5.5 e 5.6, os resultados obtidos para o k_{ef} com os programas CITATION e LASER respectivamente.

Estudou-se o efeito da autoblindagem energética na região de energia epitérmica, para algumas células de interesse, através da execução do módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II / 33 /. Este módulo foi usado aqui para gerar a biblioteca epitérmica de dados nucleares, para o problema especificado em estudo, numa estrutura de multigrupos

compatível com o sistema HAMMER-TECHNION.

Uma metodologia, mais refinada para análise de experimentos críticos foi desenvolvida, combinando a capacidade de pré-processamento dos dados nucleares do sistema NJOY / 50 / e a condição de autoblindagem mútua dos núcleos actínidos através do módulo ROLAIDS do AMPX-II. Esta metodologia de cálculo foi aplicada a duas células críticas de $UO_2-2\%PuO_2(8\%Pu-240)$, sendo os dados nucleares básicos fornecidos pelas bibliotecas ENDF/B-IV e JENDL-2. A configuração da célula unitária cilindrizada, utilizada aqui, consiste de três regiões distintas: uma região interna para o combustível, uma região revestindo a região do combustível denominada "cladding", e uma região mais externa para o moderador. A região do combustível foi subdividida num conjunto de dez zonas de áreas iguais; isto para se verificar as secções de choque auto-blindadas dos actínidos ao longo do raio do "pellet". Os resultados obtidos com este tipo de metodologia estão discutidos no capítulo 6.

CAPÍTULO 2 : DESCRIÇÃO DOS EXPERIMENTOS ANALISADOS . -

Neste capítulo descreveremos os sistemas críticos estudados, apresentando alguns detalhes dos arranjos experimentais e as especificações de cada tipo de vareta combustível.

A metodologia de cálculo, bem como os principais parâmetros celulares calculados com as rotinas que compõem o sistema computacional HAMMER-TECHNION, os quais são objetos de estudo deste trabalho, são apresentados no próximo capítulo. Aqui procurou-se, na medida do possível, definir esses parâmetros tal como é feito neste sistema computacional, para que o leitor interessado possa ter uma rápida identificação desses parâmetros nas várias subrotinas independentes que compõem este código.

Para as células de $UO_2-2\%PuO_2$ e $UO_2-4\%PuO_2$, os dados utilizados neste trabalho referem-se ao experimento realizado por Uotinen e colaboradores / 88 /. Tais experimentos fazem parte de uma série de outras pesquisas, compondo o Programa de Utilização do Plutônio (PUP), desenvolvidas pelo grupo de estudo de física de reatores do Pacific Northwest Laboratories.

Os dados referentes às varetas combustíveis de $UO_2-6,6\%PuO_2$, utilizados neste trabalho, estão publicados no "Saxton Plutonium Program" / 84 /, desenvolvido pela Westinghouse Electric Corporation.

Todas as células estudadas são moderadas com água leve e as varetas combustíveis revestidas ("cladding") com zircaloy-2. As densidades isotópicas dos vários nuclídeos que compõem a célula podem ser obtidas através da expressão :

$$N_j^i = \frac{\rho N_a}{M} w_j^i \frac{\nu_j A_j}{A_j^i} \quad (2.1)$$

onde: N_j^i = densidade atômica do i -ésimo isótopo no j -ésimo elemento da mistura que compõe a região (combustível, cladding ou moderador);

N_a = número de Avogadro;

ρ = densidade do composto químico;

M = massa molecular do composto;

w_j^i = fração em massa do isótopo i no elemento j ;

A_j^i = massa atômica do isótopo i do elemento j ;

A_j = massa atômica média do elemento j ;

ν_j = número de átomos associado com o elemento j no composto molecular.

Nas células estudadas, os compostos químicos são: UO_2 - PuO_2 para a região do combustível, zircaloy-2 para o encamisamento, e água leve para a região do moderador. Para cálculo da densidade isotópica do zircaloy-2 considerou-se esta liga constituída de 98,1% de zircônio, 1,6% de estanho, 0,16% de ferro e 0,14% de crômio, sendo a densidade deste composto igual a 6,55 g/cm³ a 20^o C. Para a água a 20^oC usou-se uma densidade de 0,998234 g/cm³. Nas seções seguintes, são fornecidas as porcentagens em massa dos diversos isótopos que compõem a região combustível das células estudadas.

2.1 - Células de UO_2 -2% PuO_2 :

As células unitárias são espaçadas de uma forma triangular ("triangular-pitched"). A Figura 2.1.1 mostra o arranjo destas "lattices" / 87 /, e na Figura 2.1.2 mostra-se um tipo de vareta combustível usado nestas células, com suas dimensões e regiões discriminadas.

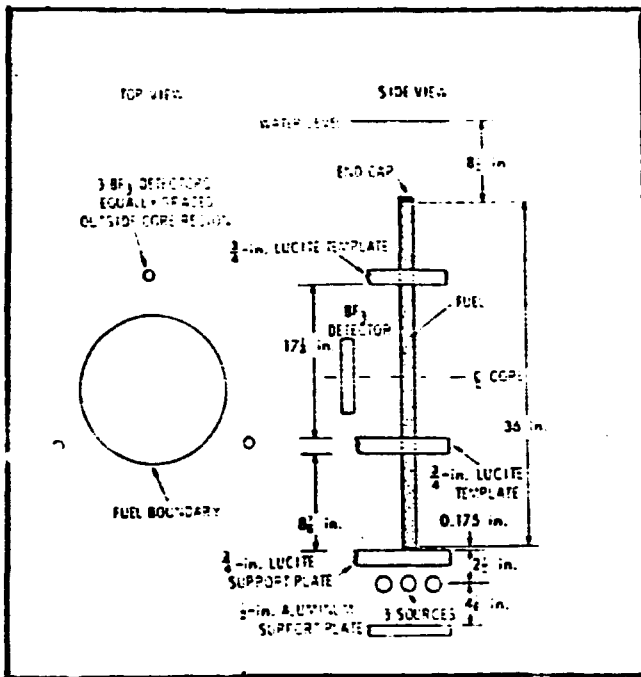


Figura 2.1.1 - Arranjo das células para varetas combustível de $UO_2-2\%PuO_2$ e $UO_2-4\%PuO_2$.

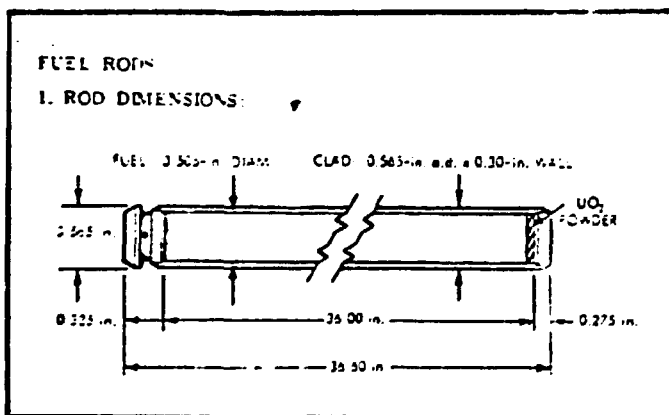


Figura 2.1.2 - Especificação das varetas combustível de $UO_2-2\%PuO_2$.

Três tipos diferentes de vareta combustível para estas células foram estudados aqui, diferenciadas pela composição do plutônio que varia de acordo com a concentração do isótopo Pu-240. A Tabela 2.1.1 mostra as características destas células.

Tabela 2.1.1
Características das células com combustível $UO_2-2\%PuO_2$

CASOS "A" - $UO_2-2\%PuO_2(8\%Pu-240)$ -Temperatura média=22°C					
CASO	BUCK(K-2)	PITCH(IN)	N.VAR.CRI	RAZ VM/VF	RAIO CRI cm
A1	93,70	0,800	319,7	1,211	19,0759
A2	103,30	0,930	192,40	1,987	17,2032
A3	101,30	1,050	152,10	2,808	17,2694
A4	97,00	1,143	147,50	3,513	18,5125
A5	75,60	1,320	163,10	5,019	22,4814
A6	68,90	1,386	179,50	5,635	24,7639
CASOS "B" - $UO_2-2\%PuO_2(16\%Pu240)$ -Temperatura média=23°C					
CASO	BUCK(K-2)	PITCH(IN)	N.VAR.CRI	RAZ VM/VF	RAIO CRI cm
B1	56,30	0,930	245,6	1,987	19,4366
B2	85,40	1,050	194,3	2,808	19,5186
B3	81,50	1,143	187,5	3,513	20,8723
B4	61,60	1,320	221,1	5,019	26,1753
B5	55,60	1,386	254,6	5,635	29,4928
CASOS "C" - $UO_2-2\%PuO_2(24\%Pu240)$ -Temperatura média=24°C					
CASO	BUCK(K-2)	PITCH(IN)	N.VAR.CRI	RAZ VM/VF	RAIO CRI cm
C1	63,10	0,800	519,5	1,211	24,3168
C2	79,40	0,930	286,1	1,987	20,9780
C3	77,60	1,050	233,2	2,808	21,3834
C4	72,20	1,143	232,1	3,513	23,2224
C5	53,70	1,320	296,2	5,019	30,2963
C6	44,30	1,386	365,3	5,635	35,3274

O diâmetro externo do combustível e o do revestimento, para estas varetas combustíveis, são 0,505 e 0,565 polegadas respectivamente. O comprimento ativo da vareta é de 36 polegadas.

As concentrações atômicas, em átomos por barn-centímetro, dos isótopos constituintes das respectivas regiões da célula foram extraídas da referência / 65 /, e são apresentadas na Tabela 2.1.2. Todavia, estas densidades isotópicas podem ser calculadas conforme a equação 2.1; estes cálculos foram feitos considerando a composição isotópica para o urânio natural como sendo de 99,274% do isótopo U-238, 0,7205% de U-235 e 0,0056% de U-234. A densidade do composto combustível (\cong 87% da densidade teórica), dada pela referência / 87 / e usada neste cálculo, é de 9,54 g/cm³. A composição isotópica do plutônio em porcentagem é dada na Tabela 2.1.3.

Tabela 2.1.2
Concentrações atômicas do combustível UO₂-2%PuO₂

NUCLÍDEO	8%PU-240	16%PU-240	24%PU-240
U-235 (Comb)	1,5040-04	1,5030-04	1,5030-04
U-238 (Comb)	2,0730-02	2,0720-02	2,0710-02
Pu-238 (Comb)	4,0000-08	-----	-----
Pu-239 (Comb)	3,9740-04	3,4820-04	3,0440-02
Pu-240 (Comb)	3,3440-05	5,7580-05	9,9400-05
Pu-241 (Comb)	2,6400-06	9,2300-06	1,6800-05
Pu-242 (Comb)	1,2000-07	8,5860-07	2,7000-06
Am-241 (Comb)	4,7000-07	-----	1,7000-06
O-16 (Comb)	4,4010-02	4,2560-02	4,2580-02
Zirc-2 (Clad)	4,2260-02	4,2260-02	4,2260-02
H-1 (Moder)	6,6710-02	6,6700-02	6,6680-02
O-16 (Moder)	3,3360-02	3,3350-02	3,3340-02

Tabela 2.1.3
Composição isotópica do plutônio

Isótopo	Casos A	Casos B	Casos C
Pu-239	91,62%	81,11%	71,76%
Pu-240	7,65%	16,54%	23,50%
Pu-241	0,70%	2,15%	4,08%
Pu-242	0,03%	0,20%	0,66%

Conforme descrito na referência / 88 /, o isótopo Pu-241 decai com uma meia-vida de aproximadamente 14,5 anos, resultando em uma diminuição gradual do plutônio físsil e um correspondente crescimento na concentração do Am-241. Com o intuito de se verificar este efeito, as concentrações de ambos os núclídeos foram medidas, para cada experimento ao longo do tempo. Em alguns casos, a quantidade de Pu-241 originalmente contida no plutônio era razoavelmente pequena; nestes casos então, desprezou-se a formação de Am-241, e os resultados podem ser vistos na referência acima citada. Cabe aqui ressaltar que a presença de Am-241, em alguns casos, resultou numa redução na reatividade calculada de cerca de 0,1 a 0,7% $\Delta k/k$.

Uma das razões para a pequena diferença entre as concentrações atômicas Aqui calculadas e as publicadas nas referências, deve-se ao fato de ter sido considerado o combustível frio, ou seja, não se considerou a queima do mesmo, o que pode provocar, entre outros bem conhecidos, o efeito acima mencionado, devido à pequena meia-vida do Pu-241 frente aos demais núclídeos. A Tabela 2.1.4 mostra as concentrações atômicas, calculadas segundo a equação 2.1, dos núclídeos que compõem este tipo de vareta combustível.

Comparando as Tabelas 2.1.2 e 2.1.4 desta seção, percebe-se perfeita concordância nas concentrações atômicas dos elementos que constituem a região do moderador. Os valores para a região de revestimento, constituída pela liga de Zircaloy-2, aparecem superestimados cerca de 2,23% na Tabela 2.1.4; isto pode ser decorrente de diferenças nos dados básicos utilizados nos cálculos, como a densidade desta liga.

Na região combustível, a diferença observada entre as concentrações atômicas dadas pelas Tabelas 2.1.2 e 2.1.4, além de ser decorrente de possíveis diferenças nos dados básicos, pode ser explicada pelo fato de a primeira ter sido obtida mediante medidas experimentais realizadas diretamente nas varetas combustíveis após um determinado tempo de utilização das mesmas, e a segunda foi idealizada considerando início de vida das varetas combustíveis. Os resultados apresentados na seção 5.1 foram obtidos com a utilização dos

dados da Tabela 2.1.2.

Tabela 2.1.4
Concentrações atômicas calculadas

NUCLÍDEO	Casos A	Casos B	Casos C
REGIÃO 1 = COMBUSTÍVEL			
U-234	1,1480000-06	1,1480000-06	1,1480000-06
U-235	1,4843200-04	1,4843200-04	1,4843200-04
U-238	2,0713377-02	2,0713377-02	2,0713377-02
Pu-239	3,8977400-04	3,4329000-04	3,0342600-04
Pu-240	3,2544000-05	7,0297000-05	9,9782000-05
Pu-241	2,9200000-06	9,1750000-06	1,7396000-05
Pu-242	1,2800000-07	8,5700000-07	2,8250000-06
O-16	4,2573406-02	4,2573022-02	4,2572642-02
REGIÃO 2 = CLADDING			
Zirc-2	4,3244217-02	4,3244217-02	4,3244217
REGIÃO 3 = MODERADOR			
H-1	6,6730348-02	6,6714832-02	6,6698648-02
O-16	3,3365174-02	3,3357416-02	3,3379653-02

Cumprе lembrar que as densidades atômicas dos vários nuclídeos, constituintes da célula unitária, são parâmetros de entrada na execução do código HAMMER-TECHNION, e como tal, é de suma importância a exatidão destes dados para uma análise segura dos resultados obtidos.

2.2 - Células de $UO_2-4\%PuO_2(18\%Pu-240)$:

Todas as "lattices" estudadas com este tipo de vareta combustível são triangulares. A Figura 2.2.1 mostra um esquema de uma face deste tipo de vareta. O diâmetro externo

do combustível e do revestimento são 0,4975 e 0,565 polegadas respectivamente. O comprimento ativo da vareta é de 36 polegadas.

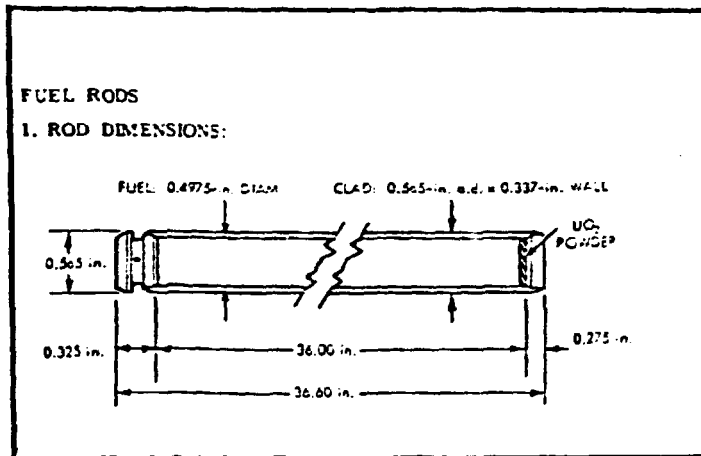


Figura 2.2.1 - Especificação da vareta

Combustível : $UO_2-4\%PuO_2$

Os dados necessários para a análise dos experimentos críticos realizados com este tipo de arranjo celular, tais como : espaçamento entre células unitárias ("pitch"), "buckling" crítico, número de varetas que formam o arranjo crítico e razão de moderação da célula foram extraídos da referência / 87 /, e são apresentados na Tabela 2.2.1. O raio crítico do reator modelado para este arranjo celular, foi calculado utilizando-se a expressão

fornecida nesta mesma referência.

Tabela 2.2.1
Características das células com combustível $UO_2-4\%PuO_2$

CASOS "D" - $UO_2-4\%PuO_2(18\%Pu-240)$ -Temperatura média=25°C					
CASO	BUCK m ⁻²	PITCH in	N.VAR.CRI	RAZ VH/VF	RAIO CRI cm
D1	94,70	0,850	252,60	1,500	18,0160
D2	107,90	0,930	178,90	1,993	16,5886
D3	108,70	1,050	138,90	2,815	16,5030
D4	107,90	1,143	122,40	3,521	16,8640
D5	88,40	1,386	123,60	5,647	20,5492
D6	59,50	1,600	180,90	7,859	28,6987
D7	41,10	1,700	271,90	9,000	37,3832

Tabela 2.2.2
Concentração atômica do
combustível $UO_2-4\%PuO_2$

NUCLÍDEO	Casos "D"
REGIÃO 1 = COMBUSTÍVEL	
U-235	1,4580-04
U-238	2,0110-02
Pu-238	2,3000-06
Pu-239	6,3000-04
Pu-240	1,5130-04
Pu-241	3,9500-05
Pu-242	9,6000-06
Am-241	3,6000-06
O - 16	4,2200-02
REGIÃO 2 = CLADDING	
Zirc-2	4,2260-02
REGIÃO 3 = MODERADOR	
H - 1	6,6660-02
O - 16	3,3330-02

Tabela 2.2.3
Composição isotópica
do plutônio (%),

Isótopo	Perc
Pu-238	0,28
Pu-239	75,38
Pu-240	18,10
Pu-241	5,08
Pu-242	1,15

As concentrações atômicas, em unidade de átomos por barn-cm, dos nuclídeos constituintes das regiões celulares foram extraídas da referência / 65 /, e são mostradas na Tabela 2.2.2. A composição do isótopo Pu-240 no elemento plutônio é de 18% em massa, sendo as composições dos demais isótopos deste elemento apresentadas na Tabela 2.2.3.

2.3 – Células de $UO_2-6,6\%PuO_2(8,57\%Pu-240)$

Diferentemente dos dois tipos de célula mostrados nas duas seções anteriores, o arranjo da célula unitária, com varetas combustíveis que contém 6,6% de PuO_2 é disposto de uma forma quadrada ("square pitch lattices"). A Tabela 2.3.1 fornece as características básicas destes arranjos celulares.

Tabela 2.3.1
Características das células com combustível $UO_2-6,6\%PuO_2$

Casos "E" – $UO_2-6,6\%PuO_2(8,57\%Pu-240)$ –					
CASO	BUCK m^{-2}	PITCH in	K.VAR.CRI	RAZ VH/VP	RAIO CRI cm
E1	108,80	0,520	472	1,68	16,1894
E2	122,10	0,560	337	2,15	14,7320
E3	159,60	0,735	151	4,72	12,9429
E4	159,30	0,792	133	5,66	13,0890
E5	128,40	1,040	117	10,73	16,1207

Os dados da Tabela 2.3.1, com exceção do raio crítico, que foi calculado conforme dito na seção precedente, foram extraídos da referência / 88 /.

Na Tabela 2.3.2, encontram-se as concentrações atômicas dos nuclídeos componentes das regiões celulares, fornecidas na referência / 84 /. Nesta mesma referência,

foi obtida a composição isotópica do elemento plutônio, e esta é mostrada na Tabela 2.3.3.

Os diâmetros externos do combustível e do revestimento deste tipo de vareta combustível são 0,3445 e 0,3910 polegadas respectivamente, e o comprimento ativo da vareta, é de 36 polegadas.

Tabela 2.3.2
Concentração atômica do combustível $UO_2-6,6\%PuO_2$

NUCLÍDEO	CASOS "E"		
REGIÃO 1 = COMBUSTÍVEL			
U-234	1,0940000-06		
U-235	1,4139400-04		
U-238	1,9731184-02		
Pu-239	1,2647130-03		
Pu-240	1,2027800-04		
Pu-241	1,2543000-05		
Pu-242	5,6600000-07		
O-16	4,2543900-02		
REGIÃO 2 = CLADDING			
Zirc-2	4,2260000-02		
REGIÃO 3 = MODERADOR			
H-1	<u>Temp:24°C</u> 6,6737206-02	<u>Temp:17,5°C</u> 6,6827154-02	<u>Temp:28°C</u> 6,6664066-02
O-16	3,3368603-02	3,3413577-02	3,3332033-02
H-1	<u>Temp:17°C</u> 6,6737206-02	<u>Temp:20°C</u> 6,6827154-02	
O-16	3,3368603-02	3,3413577-02	

CASO	Temp.Média Mod.
E1	24,0° C
E2	17,5° C
E3	28,0° C
E4	17,0° C
E5	20,0° C

Tabela 2.3.3
Composição isotópica do plutônio

NUCLÍDEO	Pu-239	Pu-240	Pu-241	Pu-242
PERCENTUAL %	90,49%	8,57%	0,89%	0,04%

Como nas concentrações atômicas dadas para os outros dois tipos de varetas estudadas, também os dados da Tabela 2.3.2 estão em unidades de átomos por barn-cm, e a composição isotópica do plutônio, dada na Tabela 2.3.3, refere-se à fração percentual em massa dos isótopos deste elemento, que aparecem na composição do combustível.

CAPÍTULO 3 – METODOLOGIA DO TRABALHO

Após a escolha dos "benchmarks" de interesse a este trabalho, procede-se a elaboração das bibliotecas de dados nucleares que devem conter, para todos os núclídeos que constituem as regiões celulares destes experimentos críticos, os parâmetros requisitados na execução do código HAMMER-TECHNION.

Preliminarmente, neste trabalho, usou-se as bibliotecas térmica (CV888.HAMMER.THLIB) e rápida (CV888.HAMMER.EPLIB) padrão deste sistema computacional, e disponível no banco de dados do Centro de Processamento de Dados do IPEN/CNEN-SP (computador IBM 4381). Estas bibliotecas foram geradas com os códigos FLANGE-II / 38 / e ETOG-3 / 3 /, respectivamente, e são constituídas por vários núclídeos, cujos dados nucleares básicos estão disponíveis na biblioteca ENDF/B-IV, com exceção do núclídeo U-238 que tem sua origem no sistema HAMMER original, sendo as mesmas independentes da aplicação.

A Tabela 3.1 mostra os valores do fator de multiplicação efetivo (K_{ef}) obtidos na execução das duas versões do código HAMMER, o sistema original denominado simplesmente HAMMER, e a versão denominada HAMMER-TECHNION, com as bibliotecas térmica e rápida originalmente usadas na Divisão de Física de Reatores do IPEN/CNEN-SP. Nesta Tabela, as colunas indicadas por : THERM. PAD. refere-se ao Thermos Padrão – programa Thermos original com o Método de Honeck / 37 / para cálculo da matriz transferência; CORR.COS. refere-se à opção para cálculo do espectro térmico utilizando o procedimento de corrente co-senoidal, e CARLVIK refere-se à opção para cálculo do espectro térmico utilizando a formulação de transporte integral discreto de Carlvik para determinação das probabilidades de escape. Desta forma, pode-se verificar o comportamento de ambas as versões do sistema HAMMER, para as várias opções de

cálculo do espectro térmico, com as bibliotecas de dados nucleares térmica e rápida geradas pelos programas FLANGE-II e ETOG3 respectivamente.

Tabela 3.1
Valores calculados de k_{ef}

CASO	H A M M E R		HAMMER-TECHNION	
	THERM.PAD.	CORR.COSS.	THERM.PAD.	C/CARLVIK
A1	0,9728634	0,9761048	0,9802495	0,9827522
A2	1,0124800	1,0153850	1,0152970	1,0182530
A3	1,0246830	1,0258610	1,0254080	1,0279370
A4	1,0201910	1,0199570	1,0198250	1,0220370
A5	1,0172460	1,0143750	1,0148720	1,0165390
A6	1,0065960	1,0027810	1,0035380	1,0049730
B1	1,0137560	1,0169100	1,0210690	1,0242090
B2	1,0236040	1,0248990	1,0269250	1,0294910
B3	1,0184310	1,0182720	1,0197290	1,0219280
B4	1,0127120	1,0009937	1,0109880	1,0125930
B5	1,0005030	0,9968023	0,9978324	0,9992120
C1	0,9781381	0,9823309	1,0010220	1,0042310
C2	0,9980405	1,0013590	1,0090480	1,0122820
C3	1,0106540	1,0120180	1,0162220	1,0187790
C4	1,0096960	1,0095900	1,0125040	1,0146620
C5	1,0004390	0,9977475	0,9994284	1,0009580
C6	0,9979069	0,9942899	0,9956288	0,9969431

A curva de k_{ef} em função do "pitch", partindo das células mais estreitas, cresce até atingir um valor máximo, para as células de "pitch" igual a 1,050 polegadas, após o qual declina, voltando a atingir valores até mesmo menores que os iniciais.

Também pode-se observar, baseado nos resultados apontados na Tabela 3.1, que as implementações realizadas na versão HAMMER-TECHNION resultam em uma elevação no valor de K_{ef} calculado com o método de Carlvik frente ao método padrão do sistema HAMMER. Quanto à versão original, observa-se que a opção de corrente co-senoidal

superestima os valores de K_{ef} , em comparação aos resultados com o método padrão de Honeck, para as células estreitas, sendo que o oposto é observado para as células mais abertas.

3.1 – Procedimento para obtenção da Biblioteca Térmica :

Para a execução do sistema HAMMER-TECHNION são necessárias bibliotecas de dados nucleares que são elaboradas distintamente para as regiões de energia térmica e rápida.

O processamento começa com as bibliotecas de dados nucleares básicos, neste trabalho, a ENDF/B-IV ou a JENDL-2. Nestas bibliotecas, todos os parâmetros necessários para os cálculos efetuados pelos códigos de análises nucleares, tais como as secções de choque microscópicas, são dispostos em função da energia da reação de interesse, numa forma pontual.

No procedimento normal, para a região térmica, o programa FLANGE-II acessa a ENDF/B-IV e prepara as secções de choque em 30 grupos de energia do nêutron, utilizando uma função ponderação disponível no programa, geralmente uma Maxwelliana na temperatura da aplicação. Para materiais que possuem leis de espalhamento do tipo $S(\alpha, \beta, T)$ / 44 /, como o hidrogênio ligado na água, o FLANGE-II calcula a matriz de espalhamento térmica necessária no THERMOS. Após este passo, o programa LITHE / 5 / formata os dados gerados pelo FLANGE-II, como as secções de choque e a matriz de espalhamento, numa forma compatível para a utilização no HAMMER-TECHNION.

Para os materiais que não possuem leis de espalhamento $S(\alpha, \beta, T)$, o LITHE calcula a matriz de espalhamento com o modelo de gás livre ou Kernel de St. John-Brown, preparando em seguida as fontes de moderação dentro de cada grupo térmico.

Outra metodologia disponível e aceitável, a qual foi utilizada neste trabalho para a geração da biblioteca térmica, é a realizada com o sistema acoplado NJOY - AMPX-II,

cujo procedimento é descrito no apêndice F.

A diferença básica entre estes dois procedimentos para obtenção da biblioteca térmica consiste no pré-processamento com o respectivo acesso ao arquivo de dados nucleares básicos, que no segundo é feito pelo sistema modular NJOY e não pelo programa FLANGE-II utilizado no procedimento original.

Além da biblioteca térmica padrão para o sistema HAMMER-TECHNION, a qual possui uma estrutura de 30 grupos de energia e energia de corte ("cut-off" térmico) em 0,625 eV, gerou-se uma biblioteca térmica em 36 grupos de energia e "cut-off" térmico em 1,855 eV, sendo o pré-processamento dos dados em ambas as bibliotecas térmicas geradas, realizado com o sistema NJOY - AMPX-II.

Para a obtenção da biblioteca térmica em 36 grupos de energia e "cut-off" térmico de 1,855 eV, utilizou-se a estrutura de faixas de velocidade do nêutron usada no programa EPRI-CELL / 79 /. Os limites destes grupos de velocidade são dados de entrada na execução do programa LITHE. A velocidade característica de cada grupo corresponde ao valor médio entre os dois limites deste grupo. Para a estrutura de grupos padrão do THERMOS, os limites de velocidade de cada grupo, utilizados no LITHE, devem ser normalizados pela energia térmica de 0,0253 eV, isto é, um valor de velocidade igual a unidade ($v=1$), corresponde a um valor de energia de 0,0253 eV.

Na Tabela 3.1.1 estão mostradas as estruturas de grupo de velocidade usadas na execução do programa LITHE .

Tabela 3.1.1
 Valores limites de velocidade $[V(i)]$ dos grupos térmicos
 e incrementos $[\Delta V(i)]$ de velocidade destes grupos

GRUPO	VELOCIDADE	INC. VELOC.	VELOCIDADE	INC. VELOC.
1	2,E-01	0,2	1,E-01	0,1
2	4,E-01	0,2	2,E-01	0,1
3	6,E-01	0,2	3,E-01	0,1
4	8,E-01	0,2	4,E-01	0,1
5	10,E-01	0,2	5,E-01	0,1
6	12,E-01	0,2	6,E-01	0,1
7	14,E-01	0,2	7,E-01	0,1
8	165,E-02	0,3	8,E-01	0,1
9	19501,E-04	0,3001599	9,E-01	0,1
10	22501,E-04	0,2998565	10,E-01	0,1
11	255,E-02	0,3000055	11,E-01	0,1
12	285,E-02	0,2999781	12,E-01	0,1
13	3075,E-03	0,1500047	13,E-01	0,1
14	321,E-02	0,1199930	14,E-01	0,1
15	33299,E-04	0,1200015	15,E-01	0,1
16	34199,E-04	0,0599821	1605,E-03	0,11
17	35049,E-04	0,1100071	172,E-02	0,12
18	36599,E-04	0,2000048	1845,E-03	0,13
19	391,E-02	0,3000307	198,E-02	0,14
20	426,E-02	0,3999872	2123,E-03	0,145
21	4715,E-03	0,5099778	2278,E-03	0,165
22	52649,E-04	0,5899965	2455,E-03	0,19
23	58449,E-04	0,5700288	266,E-02	0,22
24	62299,E-04	0,1998510	2898,E-03	0,255
25	63749,E-04	0,0902120	3173,E-03	0,295
26	64349,E-04	0,0297902	349,E-02	0,34
27	64649,E-04	0,0302633	3855,E-03	0,39
28	6405,E-03	0,0298191	4273,E-03	0,445
29	65499,E-04	0,0799574	4733,E-03	0,475
30	66899,E-04	0,1999946	527,E-02	0,600
31	69899,E-04	0,4000670		
32	739,E-02	0,4000704		
33	7765,E-03	0,3499531		
34	81,E-01	0,3201075		
35	84114,E-04	0,3026192		
36	87269,E-04	0,3283654		

Para todos nuclídeos processados com o LITHE, para ambas as bibliotecas térmicas

geradas, para a temperatura necessária no cálculo das reações de espalhamento usou-se o valor de 300°K, identificados pelo índice 1030. no item 5 dos dados entrada deste programa. Nas Tabelas 3.1.2 e 3.1.3, apresenta-se os dados pertinentes a cada nuclídeo processado neste trabalho. Os valores do número de médio de nêutrons de fissão (ν) e da secção de choque elástica (σ_e) usada nos cálculos de fonte, apresentados na Tabela 3.1.2, foram obtidos mediante o pré-processamento da biblioteca ENDF/B-IV.

O sistema acoplado NJOY - AMPX-II foi usado também para acessar a biblioteca JENDL-2, e criar a biblioteca térmica para alimentação do código HAMMER-TECHNION. Assim pode-se comparar a qualidade dos dados nucleares fornecidos por este arquivo com aqueles fornecidos pela ENDF/B-IV. Ressalta-se aqui que os dados, para este caso, necessários para a execução do LITHE, só diferenciam do processo anterior nos valores de ν e σ_e . Os números de identificação dos vários nuclídeos, constituintes das células estudadas, com a biblioteca gerada via JENDL-2, foram convenientemente diferenciados daqueles processados com o ENDF/B-IV. A Tabela 3.1.3, mostra as principais características destes nuclídeos.

Tabela 3.1.2
Dados característicos dos nuclídeos usados no LITHE
biblioteca térmica via ENDF/B-IV → NJOY - AMPX-II.

NUCLÍDEO	IDENTIF.	ν	MASSA(amv)	σ_e (barn)
Hidrogênio-1	1001.	0,0	1,0078	20,8170
Oxigênio-16	8016.	0,0	15,9954	3,7524
Uranio-234	92234.	2,3706	234,0406	10,4280
Uranio-235	92235.	2,4188	235,0442	13,3300
Uranio-238	92238.	0,0	238,0510	8,8640
Plutonio-239	94239.	2,873	239,0526	10,9910
Plutonio-240	94240.	2,870	240,0542	10,3160
Plutonio-241	94241.	2,9323	241,0488	11,5530
Plutonio-242	94242.	0,0	242,2259	7,5915
Americio-241	95241.	3,0900	241,0600	4,1930
Zircaloy-2	302.	0,0	91,2196	6,2012

Tabela 3.1.3
Dados característicos dos nuclídeos usados no LITHE
biblioteca térmica via JENDL-2 → NJOY - AMPX-II.

NUCLÍDEO	IDENTIF.	ν	MASSA(amu)	σ_e (barr.)
Hidrogênio-1	1001.	0,0	1,0078	22,0760
Oxigênio-16	8016.	0,0	15,9954	3,7528
Uranio-234	92234.	2,370	234,0406	12,1330
Uranio-235	23501.	2,4266	235,0442	14,4610
Uranio-238	23801.	2,3195	238,0510	8,7927
Plutonio-239	23901.	2,8806	239,0526	11,2620
Plutonio-240	24001.	2,7838	240,0542	3,1351
Plutonio-241	24101.	2,9323	241,0600	10,7930
Plutonio-242	94242.	2,8080	242,0600	7,4963
Americio-241	95241.	3,2235	241,0600	14,4030
Zircaloy-2	302.	0,0	91,2200	6,2013

Algumas observações devem ser feitas quando se compara as Tabelas 3.1.2 e 3.1.3, como por exemplo, o valor de ν do nuclídeo U-238, considerado zero na tabela 3.1.2. Isto é feito por causa que a secção de choque de fissão deste nuclídeo é aproximadamente zero, porém, fisicamente existe uma valor numérico diferente de zero para este parâmetro na ENDF/B-IV. Na biblioteca JENDL-2 este parâmetro possui um valor até mesmo próximo ao do nuclídeo U-235. A mesma observação feita para o ν do U-238 é verificada também para o isótopo do plutônio Pu-242. Para a maioria dos isótopos estudados, o valor deste parâmetro fornecido pelo JENDL-2 (ν_j) é maior que o valor fornecido pelo ENDF/B-IV (ν_e), sendo a diferença percentual $((\nu_j - \nu_e)/\nu_e)$, para este dado, entre as duas fontes, variando desde 0,26% ocorrida no Pu-239 até 4,32% ocorrida no Am-241. Entretanto o inverso é observado para o isótopo Pu-240, o qual apresenta uma redução no valor de ν_j frente ao valor de ν_e , sendo a diferença percentual dada em cerca de -3,09% .

Outro fato a ressaltar é a diferença entre os valores da secção de choque elástica (σ_e), fornecidos por ambas as bibliotecas de dados nucleares básicos acessados. Os valores deste parâmetro, obtidos com a biblioteca JENDL-2 (σ_j), para o hidrogênio, os isótopos do

urânio e o isótopo Pu-239, apresentam-se levemente acima dos valores fornecidos pela biblioteca ENDF/B-IV (σ_c), porém esta diferença ($(\sigma_j - \sigma_c)/\sigma_c$), a maior apresentada, é bem mais acentuada para o nuclídeo amerício-241 (cerca de 243%). Por outro lado, para os isótopos do plutônio Pu-240, Pu-241 e Pu-242, a situação é invertida, cabendo a maior discrepância ao isótopo Pu-240, que apresenta uma redução deste parâmetro obtido com o JENDL-2, frente ao ENDF/B-IV, de cerca de 229%.

3.2 – Procedimento para obtenção da biblioteca rápida.

Para a região de energias epitérmica e rápida, o programa ETOG-3 prepara as secções de choque, a matriz de espalhamento inelástico e os parâmetros necessários para o procedimento do programa MUFT (σ_s , $\bar{\mu} \sigma_s$, etc) em 54 grupos de energia, e para os materiais que possuem ressonâncias, este programa prepara os parâmetros (Γ_n , Γ_γ , etc) requisitados para o cálculo da autoblindagem nas ressonâncias. Em seguida o programa HELP / 5 / formata os dados processados pelo ETOG-3 compativelmente com a biblioteca epitérmica do HAMMER-TECHNION.

Para efeito de verificação dos resultados obtidos para os parâmetros celulares calculados com o sistema HAMMER-TECHNION, quando se eleva sua energia de corte térmica original (0,625eV) para 1,855 eV, foi mantida a biblioteca epitérmica originalmente processada e disponível. Assim sendo, qualquer discrepância entre os valores dos parâmetros, calculados para os dois "cut-off" acima, que porventura viesse a ocorrer, poderia ser explicada simplesmente pelas diferentes abordagens feitas nas duas distintas bibliotecas térmicas processadas e apresentadas na seção precedente.

Todavia, vários procedimentos numéricos, melhores que o utilizado pelo ETOG-3, têm sido desenvolvidos para se tratar os efeitos das interferências das ressonâncias para as bibliotecas de multigrupo pré-processadas. Assim sendo, a fim de se utilizar um método de cálculo mais refinado para o tratamento dos nuclídeos ressonantes, na região de energias

com ressonâncias resolvidas, para as células identificadas na seção 2.1 como os casos A1, A3 e A6, procedeu-se a execução do módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. Os resultados, com este procedimento, estão apresentados no capítulo 6 .

Os fatores de autoblindagem nesta faixa de energia foram analisados comparando os resultados obtidos para as secções de choque de captura e de fissão para os núclídeos U-235, U-238 e Pu-239, com o tratamento de diluição infinita feito pelo sistema NJOY com os obtidos com o módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. Esses resultados também são apresentados no capítulo 6.

Um trabalho semelhante, desenvolvido com esta mesma intenção de se estudar os efeitos da interferência entre ressonâncias, é apresentado na referência / 97 /. Um método mais aperfeiçoado / 94 / para o cálculo dos fatores de interferência entre ressonâncias é apresentado, e os valores dos fatores de interferência calculados com este método são comparados àqueles obtidos com o módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II, também utilizado neste trabalho..

Na execução do programa HELP, nos casos onde se procedeu a elaboração da biblioteca epitérmica, utilizou-se o espectro de fissão do núclídeo U-235, como normalmente é feito no procedimento padrão de montagem desta biblioteca pelo sistema HAMMER-TECHNION. Entretanto, o espectro de fissão do núclídeo Pu-239 também foi utilizado em casos onde se dividiu a região do combustível em 10 subregiões / 71 /. Os resultados também são apresentados no capítulo 6 .

3.3 – Principais Parâmetros Celulares Integrais

Analisados com o HAMMER-TECHNION

Nesta seção são apresentadas as constantes celulares, consideradas mais relevantes para o estudo realizado neste trabalho, dando suas definições na medida do possível tal

como é feito no sistema HAMMER-TECHNION. Alguns valores calculados destas constantes serão mostrados aqui simplesmente quando houver intenção de realçar sua definição. Todavia, o capítulo 5 foi reservado para a apresentação detalhada dos resultados obtidos, bem como uma discussão refinada destes resultados.

3.3.1 – O Fator de Multiplicação Efetivo (k_{ef}) . –

É definido como a razão entre a população de nêutrons em uma geração e a população na geração imediatamente anterior. Para um sistema considerado crítico, o fluxo de nêutrons é constante ao longo do tempo o que resulta em $k_{ef} = 1$.

O valor de k_{ef} é calculado na subrotina KEFC, segundo a equação 3.3.1.1 dada abaixo,

$$k_{ef} = C_1[M_1 + P_1M_2 + P_1P_2M_3 + P_1P_2P_3M_4] + C_2[M_2 + P_2M_3 + P_2P_3M_4] + C_3[M_3 + P_3M_4] \quad (3.3.1.1)$$

onde: $M_i = [\nu\Sigma_f / (\Sigma_a + \Sigma_r + DB^2)]_i$ e $P_i = [\Sigma_r / (\Sigma_a + \Sigma_r + DB^2)]_i$;

C_i = espectro de fissão do macrogrupo $i=1$ a 4;

D = coeficiente de difusão do macrogrupo i ;

Σ_a = secção de choque de absorção do macrogrupo do i ;

Σ_r = secção de choque de remoção do macrogrupo i ;

$\nu\Sigma_f$ = ν vezes a secção de choque fissão do macrogrupo i ;

B^2 = "Buckling" (cm^{-2}).

Quando o valor do "buckling" é considerado igual a $1,0E-10$, o programa calcula o valor do fator de multiplicação infinito ($k\text{-inf}$).

As constantes usadas na expressão 3.3.1.1, com exceção do "buckling" (B^2), que está em unidade de cm^{-2} , e que é um parâmetro de entrada fornecido pelo usuário, são calculadas na subrotina EDIT12; o subscrito i refere-se aos 4 macrogrupos obtidos da colaptação dos 54 grupos da biblioteca epitérmica em 3 macrogrupos e da colaptação dos 30 grupos térmicos em 1 macrogrupo.

Desta forma, as secções de choque e o coeficiente de difusão da expressão 3.3.1.1 são os parâmetros homogeneizados e colapsados em quatro grupos que serão apresentados na seção 3.4. Estes parâmetros são impressos na subrotina EDIT12.

Como a fuga é uma das mais importantes fontes de erro nas análises teóricas, é interessante verificar se há evidências de efeitos sistemáticos nos resultados devido à fuga de nêutrons do sistema. Com esta finalidade, os valores calculados de k_{ef} são plotados em função do "buckling", utilizado na equação 3.3.1.1, que determina o valor deste parâmetro. Os resultados desta análise, para as células de UO_2 -2% PuO_2 (8,16 e 24% de Pu-240), podem ser vistos nas Figuras 3.3.1.1, 3.3.1.2 e 3.3.1.3.

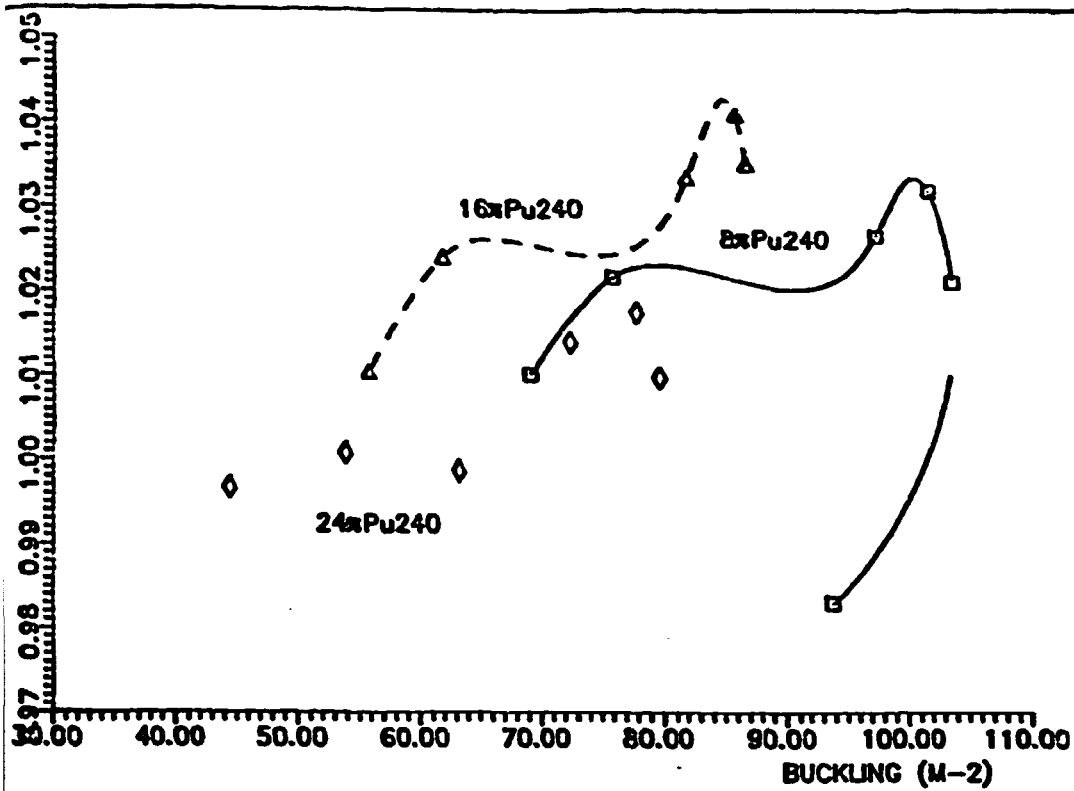


Figura 3.3.1.1 - K -efetivo X BUCKLING

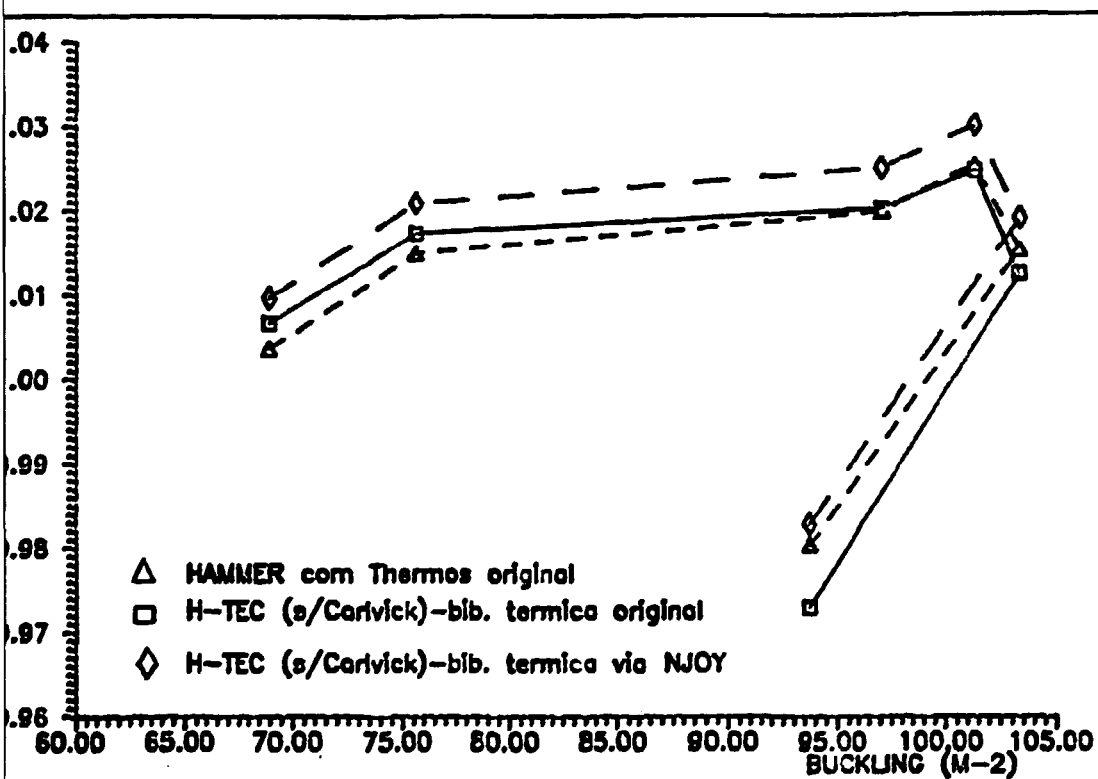
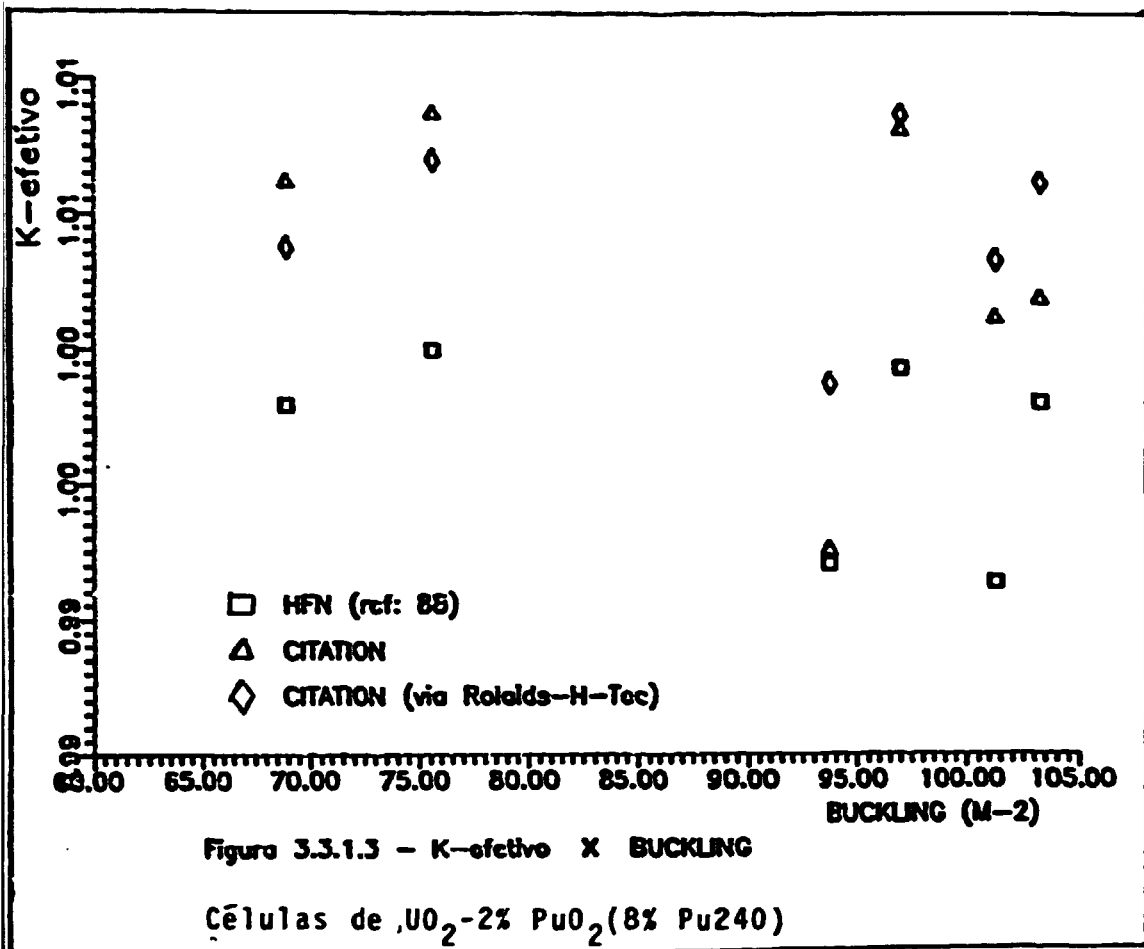


Figura 3.3.1.2 - K -efetivo X BUCKLING

Colulas de $UO_2-2\%PuO_2(8\%Pu240)$



Examinando os resultados plotados na Figura 3.3.1.1, nenhuma tendência notável para fuga é verificada, o que leva a crer que, ou o tratamento dado à fuga neste trabalho é adequado, ou se houver erros, estes são compensados por outros possíveis erros existentes na análise.

3.3.2 – O Fator de Multiplicação Infinito (k-inf) –

Na literatura básica / 8, 24, 45, 80 / este parâmetro é definido como o fator de multiplicação de nêutrons em sucessivas gerações para um sistema infinito, ou seja, um sistema sem fugas de nêutrons. Para um reator térmico, este parâmetro pode ser calculado usando a expressão :

$$k_{\infty} = \eta_T f p \epsilon \quad (3.3.2.1)$$

onde: η_T = número médio de nêutrons emitidos por fissão

por nêutron térmico absorvido pelo combustível;

f = fração de nêutrons térmicos absorvidos no combustível =

= fator de utilização térmica;

p = probabilidade de escape à ressonância;

ϵ = razão entre o número total de nêutrons de fissão, para

um meio infinito, (nêutrons produzidos nas fissões rá-

pidas mais nêutrons produzidos nas fissões térmicas),

pelo número de nêutrons produzidos apenas nas fissões

térmicas = fator de fissão rápida.

As quantidades usadas na determinação do k_{∞} , acima descritas, serão brevemente apresentadas nas seções seguintes.

O valor deste fator é calculado na subrotina KEFC por intermédio da expressão 3.3.1.1, assumindo um valor de "buckling" $B^2 = 1,0E-10$. Nas Figuras 3.3.2.1 a 3.3.2.5 pode-se ver o comportamento do k_{∞} em função das quantidades envolvidas em seu cálculo.

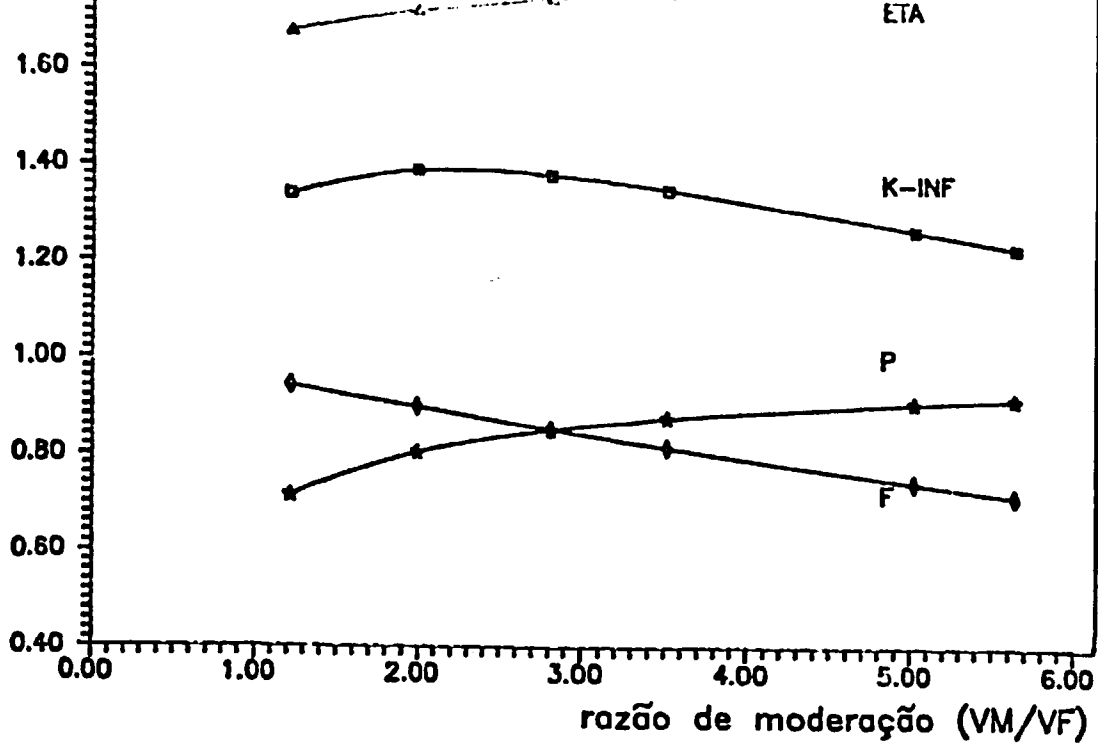


Figura 3.3.2.1 - Parâmetros celulares X razão de moderação
 Celulas UO₂-2%PuO₂(8%Pu240) c/ Carvix. - c.off=1,855 eV

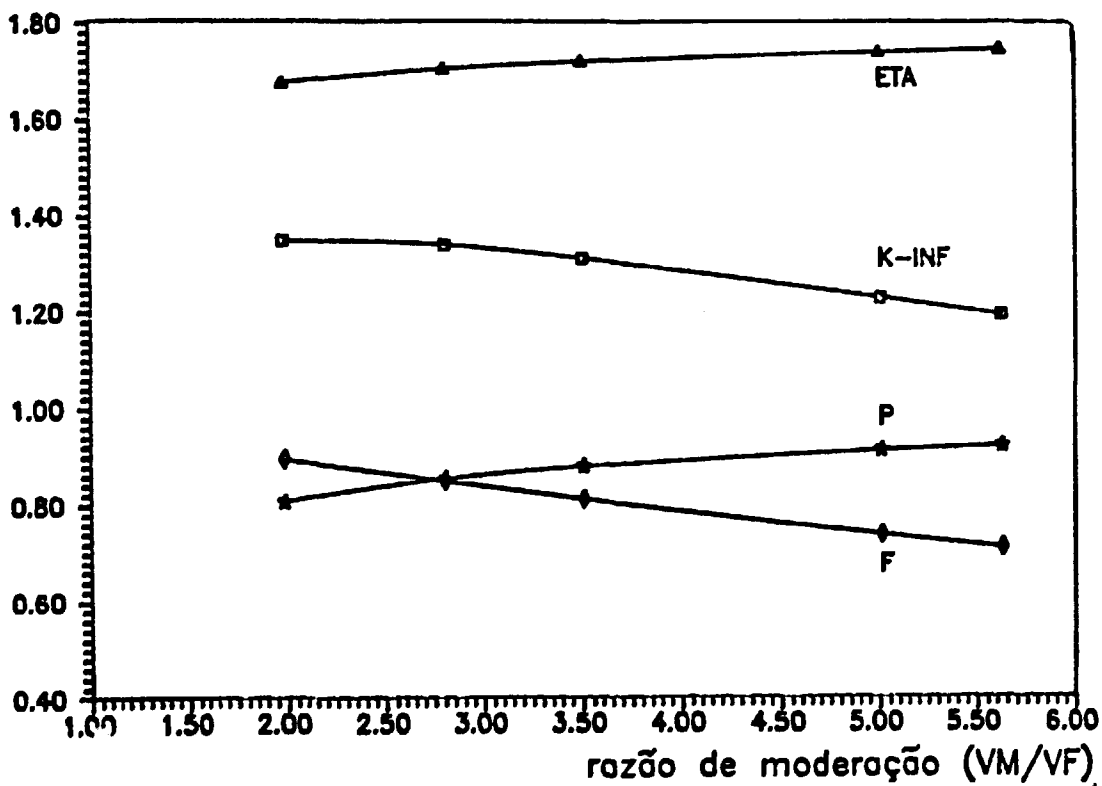


Figura 3.3.2.2 - Parâmetros celulares X razão de moderação
 Celulas UO₂-2%PuO₂(16%Pu240) c/Carvix. - c.off=1,855 eV

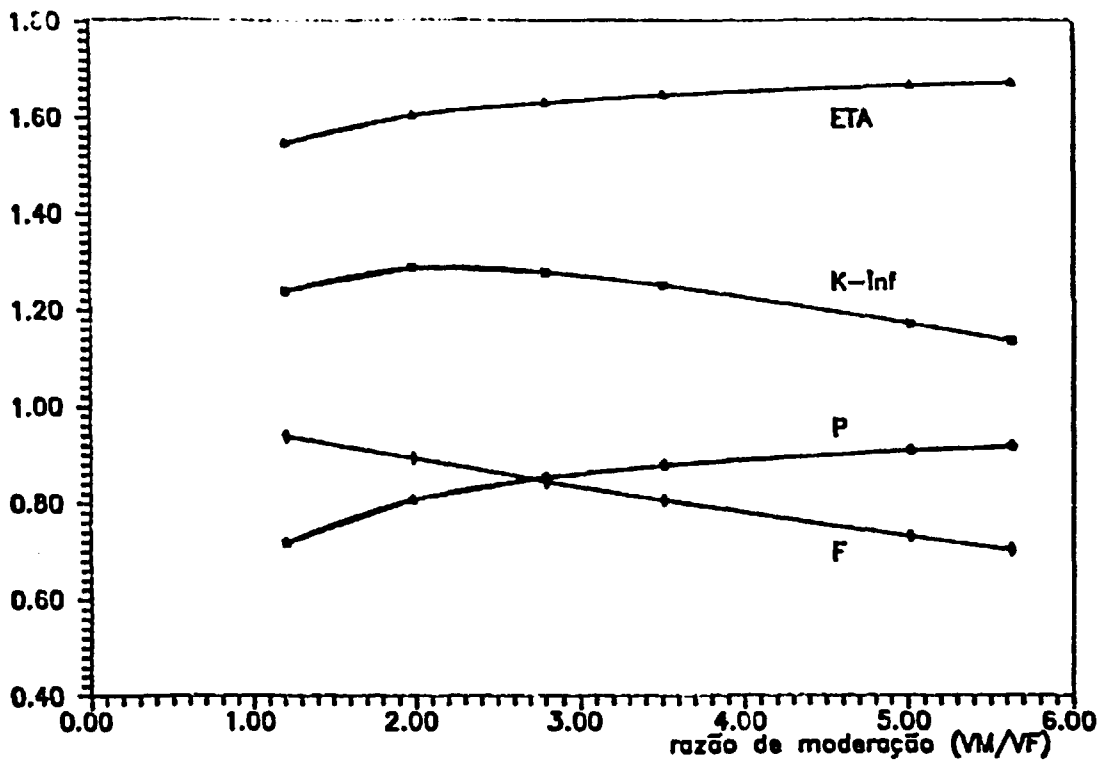


Figura 3.3.2.3 - Parâmetros celulares X razão de moderação
 Células UO₂-2%PuO₂(24%Pu²⁴⁰) c/ Carviki - c.off=1.855 eV

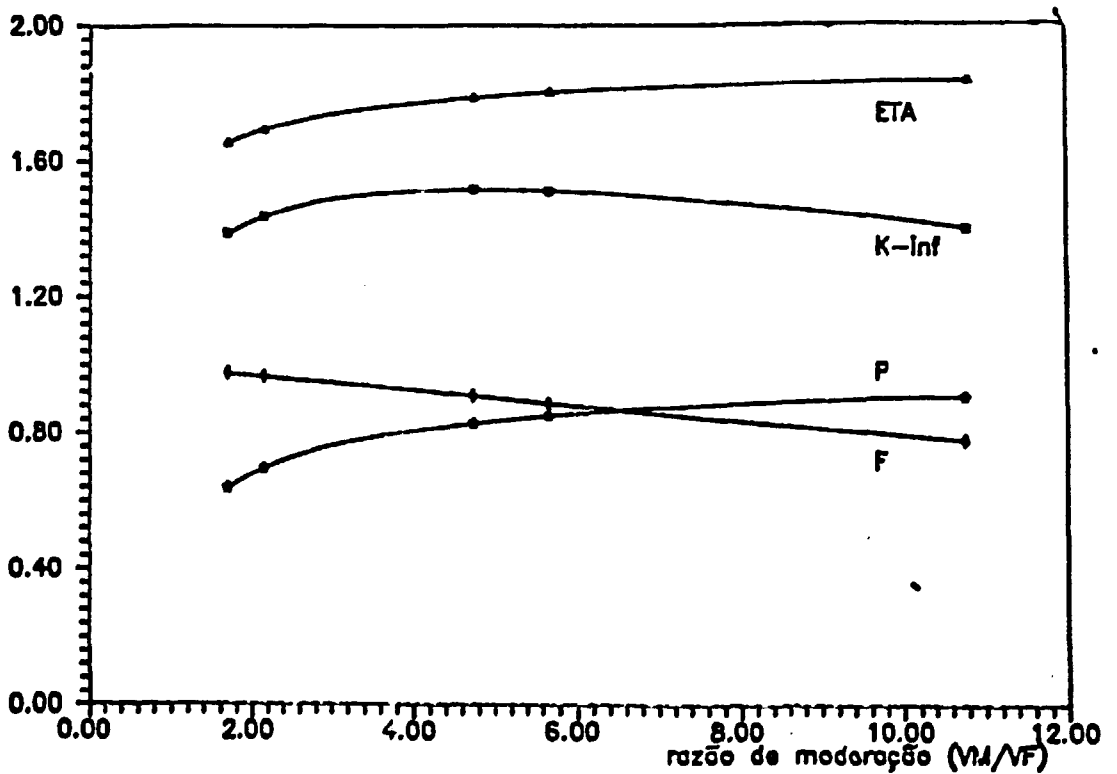


Figura 3.3.2.4 - Parâmetros celulares X razão de moderação
 Células UO₂-4%PuO₂(18%Pu²⁴⁰) c/ Carviki - c.off=1.855 eV

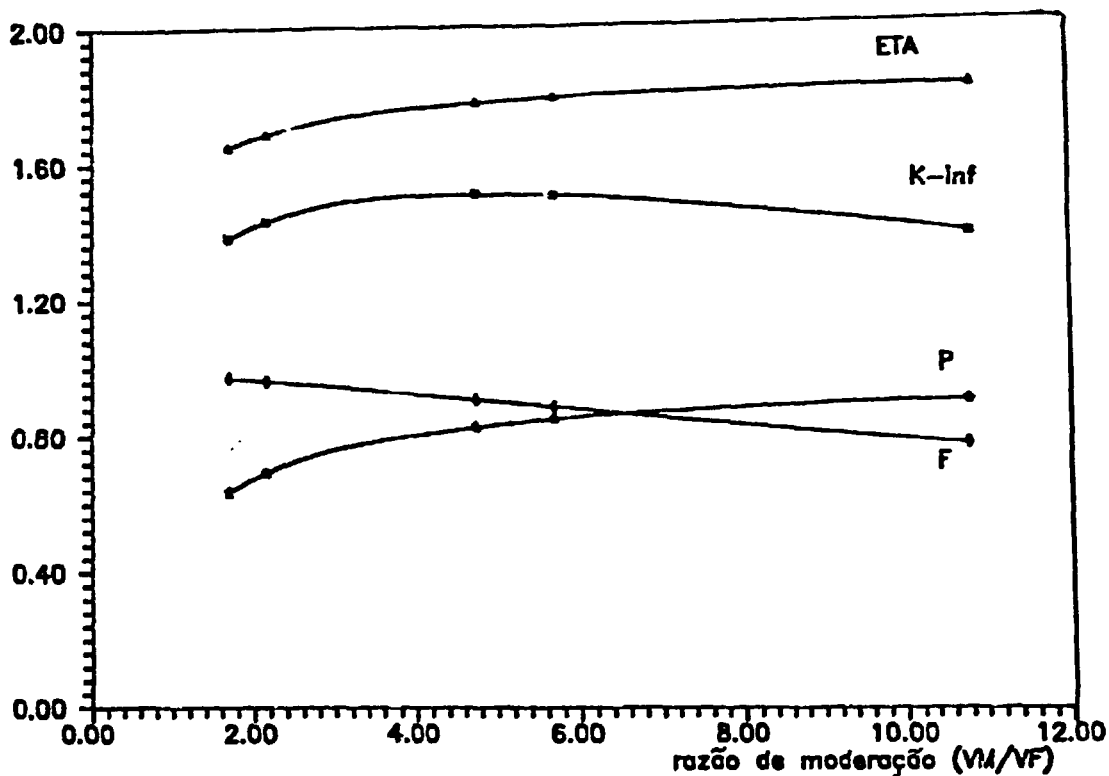


Figura 3.3.2.5 - Parâmetros celulares X razão de moderação
 Células UO₂-6.6%PuO₂(8.57%Pu240) c/ Carvix - c.off=1.855 eV

3.3.3 - Número médio de nêutrons produzidos por fissão por nêutron térmico absorvido no combustível(η)

Este parâmetro, definido na região de energias térmicas, é calculado no programa THERMOS, mais precisamente na subrotina EDIT, a qual imprime seu valor para uma rede infinita de células unitárias sem fuga de nêutrons. As frações de absorção e produção (ν vezes a fração de fissão) são calculadas por isótopo e região, e o valor de η é obtido pela expressão:

$$\eta = \left[\sum_i \nu \Sigma_f \right] / \left[\sum_i \Sigma_a \right] \quad (3.3.3.1)$$

onde os símbolos Σ_a e $\nu \Sigma_f$ referem-se às secções de choque macroscópicas de absorção e de produção por isótopo na região do combustível. Os valores de η para os núclídeos constituintes de algumas células de interesse estão mostrados na Tabela 3.3.3.1.

Tabela 3.3.3.1
Valores de η - Células com 2% PuO₂

NUCLÍDEO	CASO A1	CASO A1	CASO C1
Pu-239	1,944721	1,950216	1,948849
Pu-240	0,000714	0,000532	0,000553
Pu-241	2,183745	2,185528	2,183993
U-235	2,065635	2,064466	2,064577

Os dados referentes à segunda coluna da Tabela 3.3.3.1 foram obtidos com a versão do HAMMER-TECHNION que possui "cut-off" térmico em 0,625 eV, enquanto que os dados constantes da terceira e quarta coluna refere-se à versão com cut-off em 1,855 eV. Todos os casos mostrados acima foram processados com a opção de "Standard Thermos" para o cálculo do espectro térmico.

A Tabela 3.3.3.2 compara os valores de η , para os núclídeos individuais quando se utiliza as duas opções de cálculo do espectro térmico: com Carlvik e "Standard Thermos".

Tabela 3.3.3.2
Valores de η - Células com 4 e 6.6% PuO₂

NUCLÍDEO	CASO D1		CASO E1	
	s/Carlvik	c/Carlvik	s/Carlvik	c/Carlvik
Pu-239	1,952735	1,940483	1,934629	1,912293
Pu-240	0,000606	0,000515	0,000571	0,000538
Pu-241	2,189351	2,188107	2,192259	2,189445
Am-241	0,019011	0,018726	-----	-----
U-235	2,065195	2,064453	2,064448	2,062969

Os valores de η colocados nas Tabelas 3.3.3.1 e 3.3.3.2, foram obtidos dividindo a fração de produção pela fração de absorção médias, para cada nuclídeo individualmente. O valor global de η , dado pela equação 3.3.3.1, o qual representa o comportamento da célula unitária como um todo, será analisado na seção 5.2 deste trabalho.

No trabalho de Ronen e Leibson / 64 /, é visto que o η do nuclídeo Pu-239 aumenta para nêutrons de altas energias mais do que o η do U-235. Assim, quanto maior o enriquecimento de plutônio na vareta combustível, mais duro é o espectro de nêutrons, e desta forma, espera-se que o η do Pu-239 para nêutrons rápidos seja o fator mais importante no decréscimo do k_{∞} como função da razão de moderação. Estudo semelhante foi desenvolvido por Uotinen / 42, 48, 86, 88 / e por Richey / 63 /, onde se verifica uma discrepância em torno de 1,05% nos valores do η do nuclídeo Pu-239. No trabalho de Richey usou-se o valor deste parâmetro ($\eta = 2,093$) normalizado a 2200 m/s, enquanto na análise de Uotinen usou-se o valor $\eta = 2,114$. Esta discrepância implica numa diferença entre as secções de choque ponderadas no espectro, o que resulta numa discrepância da mesma ordem no valor do k-eff calculado.

3.3.4 – Fator de utilização térmica da célula (f) . –

Também é calculado na subrotina EDIT. É comumente definido como a fração de nêutrons térmicos que são absorvidos pelo combustível. A soma das frações de absorção de cada nuclídeo na região do combustível fornece o f da célula unitária em questão.

$$f = \frac{\bar{\phi}_F V_F \bar{\Sigma}_F}{\bar{\phi}_F V_F \bar{\Sigma}_F + \bar{\phi}_M V_M \bar{\Sigma}_M + \bar{\phi}_C V_C \bar{\Sigma}_C} \quad (3.3.4.1)$$

onde : $\bar{\phi}_F, \bar{\phi}_M, \bar{\phi}_C$ = fluxos médios no combustível, moderador e revestimento;

$\bar{\Sigma}_F, \bar{\Sigma}_M, \bar{\Sigma}_C$ = secções de choque macroscópicas de absorção do combustível, moderador e revestimento;

V_F, V_M, V_C = volumes do combustível, moderador e revestimento.

A Tabela 3.3.4.1 mostra o valor das frações de absorção para os nuclídeos constantes em algumas células de interesse. Como na seção anterior, os dados da segunda coluna desta tabela diferem dos dados da terceira e quarta colunas quanto a energia de corte térmica utilizada no código HAMMER-TECHNION.

Na Tabela 3.3.4.2 pode-se comparar os valores da fração de absorção térmica no combustível, obtidos com as duas opções de cálculo do espectro de nêutrons térmicos. Pode-se verificar que o valor da fração de absorção térmica, obtido quando se usou o método de Carlvik para cálculo do espectro térmico, é menor que o valor obtido sem esta opção de cálculo, para a maioria dos nuclídeos envolvidos, sendo esta situação invertida para os nuclídeos amerício-241 e plutônio-240. A variação do valor deste parâmetro para o nuclídeo Pu-240, neste tipo de análise, faz com que o valor do fator de utilização térmica da célula obtido quando se utiliza o método de Carlvik nos cálculos térmicos, para a versão com o novo "cut-off", seja maior que o valor obtido quando não se utiliza este método.

Tabela 3.3.4.1
Valores da fração de absorção na região
do combustível - células com 2%PuO₂

NUCLÍDEO	CASO A1	CASO A1	CASO C1
Pu-239	0,72488	0,68816	0,58514
Pu-240	0,01399	0,05632	0,10836
Pu-241	0,00566	0,00539	0,03511
Pu-242	0,00000	0,00000	0,00008
U-234	-----	-----	0,00014
U-235	0,11899	0,11603	0,12605
U-238	0,07058	0,07070	0,07629
O-16	0,00001	0,00001	0,00001

Tabela 3.3.4.2
Valores da fração de absorção na região do
combustível - células com 4 e 6,6% PuO₂

NUCLÍDEO	CASO D1		CASO E1	
	s/Carlvik	c/Carlvik	s/Carlvik	c/Carlvik
Pu-239	0,67873	0,67410	0,80862	0,79732
Pu-240	0,09885	0,11638	0,08742	0,11142
Pu-241	0,04489	0,04322	0,00801	0,00739
Pu-242	0,00016	0,00015	0,00001	0,00001
Am-241	0,00263	0,00267	-----	-----
U-234	-----	-----	0,00004	0,00004
U-235	0,07025	0,06687	0,03817	0,03462
U-238	0,04271	0,04096	0,02483	0,02306
O-16	0,00001	0,00001	0,00000	0,00000

Ainda analisando os dados das Tabelas 3.3.4.1 e 3.3.4.2, nota-se que em todos os casos estudados, o nuclídeo plutônio-239 é o grande responsável pelo fator de utilização térmica da célula, sendo acompanhado pelo urânio-235. Nas células com 4% e 6,6% de PuO₂, onde a concentração atômica do nuclídeo urânio-235 é próxima à do plutônio-240, percebe-se uma maior influência deste último no valor do parâmetro aqui estudado.

No capítulo 5 o valor de *f* obtido para várias células será apresentado, e uma análise do comportamento deste parâmetro em função da razão de moderação da célula será desenvolvida.

3.3.5 – Probabilidade de escape à Ressonância (p). –

É definida como a probabilidade de um nêutron com energia na faixa de energia de ressonância escapar à captura do absorvedor. No código HAMMER TECHNION é calculado da forma :

$$p_1 = \left[\frac{\Sigma_r}{\Sigma_a + \Sigma_r} \right]_1 \quad (3.3.5.1)$$

onde : Σ_r = secção de choque de remoção colapsada no macrogrupo

I para a célula homogeneizada;

Σ_a = secção de choque de absorção colapsada no macrogrupo

I para a célula homogeneizada;

Assim sendo, a expressão acima mede a probabilidade de um nêutron ser removido de um grupo mais rápido para outro de menor energia mais próximo.

Como opção deste sistema computacional, o valor de p é calculado, e impresso na subrotina EDIT12, considerando três, dois e um macrogrupo. Os "break points" da combinação padrão dos 54 grupos são aqueles apresentados no apêndice B. Sua utilização determina que as fissões rápidas do nuclídeo urânio-238 ocorram principalmente no macrogrupo 1 e a absorção nas ressonâncias será mais abrangida no macrogrupo 3. O valor de p calculado em 1 macrogrupo apenas (o que corresponderá à colapso dos 54 grupos da biblioteca epitérmica em apenas um macrogrupo), mede a probabilidade de um nêutron rápido ir para uma energia térmica. Entretanto, ressaltamos aqui que, classicamente o parâmetro p é definido como a probabilidade de escape do macrogrupo 3.

Na Tabela 3.3.5.1, mostra-se o valor de p calculado para algumas células de interesse.

Tabela 3.3.5.1 :
Valores calculados da probabilidade de escape à ressonância

GRUPO	CASO A1	CASO A1	CASO C1	CASO D1	CASO E1
1 of 1	0,663997	0,715248	0,718362	0,728256	0,637023
1 of 3	0,949734	0,949735	0,949569	0,954719	0,947089
2 of 3	0,971196	0,971197	0,971728	0,975118	0,966319
3 of 3	0,715004	0,769848	0,771241	0,776764	0,691337

Os valores apresentados na Tabela 3.3.5.1 foram obtidos utilizando o método "Standard Thermos" para o cálculo do espectro de nêutrons térmicos, uma vez que este parâmetro, pelo menos para os casos estudados, mostrou-se invariável quando calculado utilizando-se o método de Carlvik para o espectro térmico. Os resultados apresentados na primeira coluna foram obtidos com a versão do HAMMER-TECHNION que utiliza o "cut-off" térmico original (0,625 eV), e as demais colunas foram obtidas com a versão que utiliza energia de corte térmica em 1,855 eV.

Comparando os resultados apresentados para o macrogrupo 3 of 3, definição clássica de p , nas duas primeiras colunas, verifica-se uma variação percentual $\Delta p \% = [(p_1 - p_2)/p_1]$ de cerca de 7,124%, onde p_1 é o valor de p calculado com a nova versão que utiliza "cut-off" térmico em 1,855 eV, e p_2 é o valor de p calculado com a versão que utiliza o "cut-off" térmico original.

O sistema HAMMER-TECHNION também calcula o valor de p quando se considera o valor do "buckling" igual a $1,0E-10$, isto é, quando não se considera a fuga de

nêutrons da célula. O valor de p obtido com este "buckling" é menor que o valor calculado com o "buckling" de entrada (valores apresentados na Tabela 3.3.5.1) para o primeiro macrogrupo, porém se mostra maior para os outros macrogrupos. Na Tabela 3.3.5.2 apresenta-se esta variação relativa $\Delta P = (P_0 - P_c) / P_0$, onde P_0 é o P calculado quando se considera o "buckling" zero e P_c é o valor de P quando se utiliza o "buckling" de entrada.

Tabela 3.3.5.2 :
Influência no valor de p devido ao "buckling"
usado nos cálculos neutrônicos

GRUPO	CASO A1	CASO A1	CASO C1	CASO D1	CASO E1
1 of 1	0,011893	0,009866	0,006479	0,007976	0,012930
3 of 3	0,005456	0,003359	0,002559	0,003249	0,005683

Como era de se esperar, a menor variação se dá para o caso C1, uma vez que este tipo de célula apresenta o menor "buckling" crítico de todas as outras.

3.3.6 – Razão entre a captura de nêutrons epitérmica e térmica para o U-238 (R-28). –

É definida como a razão entre a captura de nêutrons pelo nuclídeo urânio-238 na região de energia rápida e epitérmica e captura de nêutrons pelo mesmo nuclídeo na região de energia térmica. É calculada e impressa na subrotina EDBEN, que expressa os parâmetros integrais para "benchmarks", usando a expressão :

$$R-28 = \frac{\sum_{i=1,2} \{[\Sigma_a^{28}(i) - \Sigma_f^{28}(i)] * FL(i)\}}{[\Sigma_a^{28}(i=4) - \Sigma_f^{28}(i=4)] * FL(i=4)}, \quad (3.3.6.1)$$

onde : $\Sigma_a^{28}(i), \Sigma_f^{28}(i)$ = secção de choque de absorção e de fissão homogeneizada para o U-238 colapsada no macrogrupo i;
 $FL(i)$ = fluxo de nêutrons para a célula homogeneizada, colapsada no macrogrupo i.

A Tabela 3.3.6.1 mostra os valores das grandezas usadas na determinação de R-28 para algumas células de interesse .

Tabela 3.3.6.1 -
 Fluxo de nêutrons e secções de choque do U-238, colapsados em 4 macrogrupos para cálculo do R-28.

I=1	CASO A1*	CASO A1	CASO C1	CASO D1	CASO E1
FL	7,2847+0	7,2846+0	7,7101+0	7,1045+0	7,0499+0
Σ_a	3,4877-3	3,4876-3	3,4940-3	2,9754-3	3,1389-3
Σ_f	3,0065-3	3,0064-3	3,0140-3	2,5709-3	2,7080-3
I=2					
FL	9,3252+0	9,3252+0	9,9549+0	8,6709+0	8,8436+0
Σ_a	1,8273-3	1,8273-3	1,8316-3	1,5362-3	1,6636-3
Σ_f	3,2427-6	3,2426-6	3,2231-6	2,7500-6	2,9043-6
I=3					
FL	7,3764+0	6,6110+0	7,2103+0	6,2035+0	5,9469+0
Σ_a	1,4065-2	1,5334-2	1,5374-2	1,3319-2	1,5777-2
Σ_f	0,0000+0	0,0000+0	0,0000+0	0,0000+0	0,0000+0
I=4					
FL	3,2322+0	3,9012+0	4,4718+0	3,4408+0	1,9214+0
Σ_a	1,0542-2	9,4416-3	9,8259-3	6,6844-3	5,8364-3
Σ_f	0,0000+0	0,0408-9	0,0349-9	0,0310-9	0,0546-9

Aqui o CASO A1* refere-se a cálculos realizados com "cut-off" térmico original e as demais colunas com o novo "cut-off".

Os dados apresentados na Tabela 3.3.6.1 foram obtidos sem a opção do método de Carlvik para cálculos do espectro térmico. Entretanto, quando esta opção de cálculo foi utilizada, verificou-se uma variação nos valores de $FL(I)$, Σ_a e Σ_f em relação aos apresentados na Tabela 3.3.6.1 apenas para o quarto macrogrupo $I = 4$ (originário da colapso de todos os grupos térmicos em apenas um macrogrupo). A variação mais importante está no valor do fluxo de nêutrons $FL(I=4)$, sendo o valor deste, obtido quando se utiliza o método de Carlvik, cerca de 6 a 13% menor que os valores apresentados na Tabela 3.3.6.1, dependendo do caso correspondente.

O efeito de se alterar a energia de corte térmica e fazer a colapso dos grupos térmicos na energia de 1,855 eV, é verificado no terceiro e quarto macrogrupo, onde um aumento no valor do fluxo $FL(I)$ resulta de um decréscimo na secção de choque de absorção $\Sigma_a(I)$ do U-238 e vice-versa.

3.3.7 – Razão entre as fissões rápida e térmica do U-235 (D-25) . –

Também calculada e impressa na subrotina EDBEN, é definida como a razão entre as fissões na região de energias epitérmica e rápida do urânio-235 e as fissões deste mesmo nuclídeo na região de energia térmica. Seu valor é dado pela expressão :

$$D-25 = \frac{\sum_{I=1,2} \{ \Sigma_f(I) * FL(I) \}}{\Sigma_f(I=4) * FL(I=4)} \quad (3.3.7.1)$$

onde : $FL(I)$ tem o mesmo significado definido na seção precedente;

$\Sigma_f(I)$ é a secção de choque macroscópica de fissão do U-235
homogeneizada e colapsada no macrogrupo I

Na Tabela 3.3.7.1 mostra-se o valor de $\Sigma_f(i)$ para o U-235, e os correspondentes valores de FL(i) podem ser vistos na Tabela 3.3.6.1 da seção precedente :

Tabela 3.3.7.1-
Secção de choque de fissão macroscópica e homogeneizada
colapsada no macrogrupo I para o U-235.

GRUPO	CASO A1*	CASO A1	CASO C1	CASO D1	CASO E1
I = 1	6,9488-5	6,9486-5	6,9500-5	5,9648-5	6,2420-5
I = 2	8,9513-5	8,9513-5	8,9676-5	7,6048-5	8,0856-5
I = 3	1,3938-3	1,2695-3	1,2734-3	1,0698-3	1,1444-3
I = 4	1,5172-2	1,3215-2	1,3850-2	9,3799-3	7,6508-3

Novamente aqui, o CASO A1* refere-se ao "cut-off" original.

Conforme se pode verificar, a elevação da energia de corte e de colapso térmica não provoca nenhuma variação no valor da secção de choque de fissão do nuclídeo urânio-235 nos dois macrogrupos mais energéticos (I=1 e I=2), entretanto, nota-se uma redução deste valor no terceiro e quarto macrogrupo.

Comparando os valores apresentados na Tabela 3.3.7.1 com valores obtidos utilizando o método de Carlvik, verifica-se uma diferença entre ambos apenas no macrogrupo térmico (I=4), sendo os valores obtidos quando se utiliza este método cerca de 1,5 a 3% maiores, dependendo do caso em questão.

3.3.8 – Razão entre a fissão do U-238 e a fissão do U-235 (D-28) . –

As células unitárias estudadas neste trabalho possuem varetas combustíveis de

UO_2-PuO_2 , sendo a porcentagem em massa do UO_2 , para todos os casos, superior a 90% e composto por urânio natural. Assim, torna-se necessário verificar, em cálculos de "benchmarks", a razão entre a fissão total (rápida mais térmica) do nuclídeo urânio-238 e a fissão total do nuclídeo urânio-235, medida pela grandeza D-28, a qual é calculada e impressa na subrotina EDBEN. O cálculo dessa grandeza utiliza as secções de choque macroscópicas homogeneizadas e colapsadas dos respectivos nuclídeos, que são preparados na subrotina EDIT3 para os 3 macrogrupos mais energéticos, e na subrotina THEFT para o quarto macrogrupo (correspondente aos grupos térmicos). A expressão utilizada para o cálculo de D-28 é dada abaixo :

$$D-28 = \frac{\sum_{I=1,4} \Sigma_f(I)^{28} * FL(I)}{\sum_{I=1,4} \Sigma_f(I)^{25} * FL(I)}, \quad (3.3.8.1)$$

O significado de cada termo da expressão acima foi dado na duas secções precedentes. O valor da secção de choque de fissão do urânio-235, para alguns casos de interesse, pode ser visto na Tabela 3.3.7.1. O valor do fluxo FL(I), bem como da secção de choque de fissão do urânio-238, para estes mesmos casos, estão apresentados na Tabela 3.3.6.1.

No capítulo 5 pode se verificar o comportamento de D-28 com a termalização da célula, bem como a influência da presença do elemento plutônio no valor desta grandeza.

3.3.9 - Razão de Conversão (CON) . -

É definida como a razão entre taxa de captura total (rápida mais térmica) do elemento urânio-238 e a taxa de fissão total do elemento urânio-235. É calculada e impressa na subrotina EDBEN que, como visto na secção anterior, utiliza grandezas pré

processadas nas subrotinas THEFT e EDIT3. O valor de CON é obtido segundo a expressão 3.3.9.1 abaixo :

$$\text{CON} = \frac{\sum_{I=1,4} \{[\Sigma_a^{28}(I) - \Sigma_f^{28}(I)] * FL(I)\}}{\sum_{I=1,4} \{ \Sigma_f^{28}(I) * FL(I)\}} \quad (3.3.9.1)$$

Novamente aqui, o significado das grandezas usadas na equação acima foi dado nas seções precedentes. Resultados obtidos para a razão de conversão para várias células unitárias estudadas neste trabalho serão apresentados no capítulo 5.

Vários estudos são constantemente realizados com o intuito de se comparar os valores calculados desta grandeza, mediante os mais variados métodos computacionais, com os valores medidos experimentalmente. Ressaltamos aqui os trabalhos de Odelli Ozer / 95 / e Schmidt / 73 / que, em ambos utilizou-se a biblioteca de dados nucleares básicos ENDF/B-V, e alguns "benchmarks" numéricos foram analisados. Para estes "benchmarks" os valores obtidos com o sistema HAMMER-TECHNION, utilizando o ENDF/B-IV, aparecem subestimados em relação aos valores obtidos com os códigos utilizados nos trabalhos de Odelli e de Schmidt. A discrepância relativa demonstra ser inversamente proporcional à razão de moderação da célula, variando de cerca de 3% para a célula mais térmica para 4,1% na célula mais estreita.

3.4 - Parâmetros Celulares Homogeneizados e Colapsados em Poucos Grupos . -

As constantes de grupo: secção de choque de remoção, coeficiente de difusão, secção

de choque de absorção, e ν vezes secção de choque de fissão, homogeneizadas na célula, as quais servem de dados de entrada para alimentação do programa CITATION, serão apresentadas aqui. Algumas observações, relevantes a esta parte do trabalho, serão feitas nesta secção; todavia uma discussão mais detalhada sobre cada um destes parâmetros constará de uma secção própria no capítulo 5.

3.4.1 – Secção de Choque de Remoção (Σ_r). –

Para os três macrogrupos epitérmicos é calculada na subrotina EDIT12 e impressa na ED12P. Para o primeiro macrogrupo ("down-scattering" para o próximo grupo), o valor de Σ_r é obtido segundo a expressão :

$$\Sigma_{r_1} = \frac{C_1}{FL_1} - (\Sigma_{a_1} + D_1 B^2) \quad (3.4.1.1)$$

Para os dois outros macrogrupos epitérmicos escreve-se :

$$\Sigma_{r_2} = \frac{C_2 + \Sigma_{r_1} FL_1}{FL_2} - (\Sigma_{a_2} + D_2 B^2) \quad (3.4.1.2)$$

e

$$\Sigma_{r_3} = \frac{C_3 + \Sigma_{r_2} FL_2}{FL_3} - (\Sigma_{a_3} + D_3 B^2) \quad (3.4.1.3)$$

onde :

C_I = espectro de fissão para o macrogrupo I;

FL_I = Fluxo de nêutrons para o macrogrupo I;

D_I = Coeficiente de difusão da célula para o macrogrupo I;

Σ_{a_I} = Secção de choque de absorção macroscópica da célula homogeneizada e colapsada no macrogrupo I;

B^2 = "Buckling" da célula.

Para o quarto macrogrupo (o macrogrupo térmico) pode-se assumir que o espectro de fissão C_4 é praticamente nulo, considerando que a única fonte de nêutrons térmicos seja a remoção do macrogrupo epitérmico $I=3$. A equação de balanço neutrônico para este grupo de energia poderá ser escrita da forma :

$$\Sigma_{r,4} FL_4 = \Sigma_{r,3} FL_3 - (\Sigma_{a,4} + D_4 B^2) FL_4, \quad (3.4.1.4)$$

Entretanto, como este macrogrupo representa todos os grupos térmicos, não haverá nêutrons sendo removidos deste para outro grupo de energia menor, o que implica dizer que o aparecimento de nêutrons nesta faixa de energia é balanceado pela absorção e pela fuga dos nêutrons térmicos do sistema.

A secção de choque de remoção, para todos os macrogrupos, aumenta com o aumento da razão de moderação da célula. Este fato requer uma análise complexa, e é resultado do efeito conjunto das variáveis envolvidas no cálculo de Σ_r , uma vez que estas se comportam diferentemente com a moderação da célula.

Os valores das grandezas envolvidas no cálculo de Σ_r , para algumas células de $UO_2-4\%PuO_2$, estão apresentados na Tabela 3.4.1.1.

Tabela 3.4.1.1
Grandezas envolvidas no cálculo de Σ_r - células com 4%PuO₂

VM/VF	I	FL(I)	Σ_a	D	DB ²	Σ_r
1,5000	1	7,1045	3,9363-3	1,86788	1,76882-2	8,29921-2
	2	8,6709	2,1922-3	1,00173	9,48638-3	8,59117-2
	3	6,8959	3,0485-2	0,66930	6,33834-3	7,12314-2
	4	2,7959	1,7349-1	0,23143	2,19168-3	-----
1,993	1	6,7319	3,4536-3	1,85347	1,99989-2	8,69551-2
	2	7,8158	1,8504-3	1,00573	1,08518-2	9,50217-2
	3	6,4115	2,6281-2	0,65148	7,02956-3	8,25549-2
	4	3,5989	1,4477-1	0,21297	2,29802-3	-----
2,815	1	6,5120	2,9311-3	1,85552	2,01695-2	9,10346-2
	2	7,2178	1,4794-3	1,01241	1,10048-2	1,05197-1
	3	6,1390	2,1305-2	0,63334	6,88450-3	9,55275-2
	4	5,0776	1,1338-1	0,19461	2,11548-3	-----
3,521	1	6,4103	2,6372-3	1,85831	2,00511-2	9,32579-2
	2	6,9350	1,2697-3	1,01660	1,09691-2	1,10961-1
	3	6,0089	1,8319-2	0,62365	6,72919-3	1,03047-1
	4	6,3308	9,5812-2	0,18496	2,11548-3	-----
5,647	1	6,4313	2,1429-3	1,88876	1,66966-2	9,67280-2
	2	6,6992	9,1079-4	1,02717	9,08018-3	1,21170-1
	3	6,0181	1,2965-2	0,60764	5,37156-3	1,16581-1
	4	10,247	6,6970-2	0,16976	1,50073-3	-----
7,859	1	6,6614	1,8946-3	1,93546	1,15159-2	9,81649-2
	2	6,8075	7,2379-4	1,03656	6,16753-3	1,26859-1
	3	6,2674	1,0050-2	0,59941	3,56650-3	1,24205-1
	4	14,473	5,2818-2	0,16250	9,66886-4	-----
9,000	1	6,8588	1,8146-3	1,96780	1,17064-2	9,84621-2
	2	6,9597	6,6078-4	1,04169	6,19805-3	1,28960-1
	3	6,4818	9,0442-3	0,59657	3,54959-3	1,27003-1
	4	16,852	4,8191-2	0,16012	9,52767-4	-----

3.4.2 - Coeficiente de Difusão (D). -

Para o macrogrupo térmico, cobrindo os grupos 1 a 29 dos 30 grupos do THERMOS ou os grupos 1 a 35 quando se utiliza a versão com o novo "cut-off", o coeficiente de

difusão térmico é calculado e impresso na subrotina THEFT, usando a expressão :

$$D_{th} = \frac{\sum_{i=1,29} V(i) F_1(i) DV(i)}{\sum_{i=1,29} V(i) F_0(i) DV(i)} , \quad (3.4.2.1)$$

onde : $V(i)$ e $DV(i)$ são velocidades e intervalos de velocidades

respectivamente, dos i grupos térmicos;

: $F_0(i)$ e $F_1(i)$ são, respectivamente, os momentos de ordem

zero e um, da transformada de Fourier da densidade angular

de nêutrons.

$F_0(i)$ e $F_1(i)$ também são calculados na subrotina THEFT, usando a expansão em polinômios de Legendre da expressão 3.4.2.2, que fornece a densidade de nêutrons por unidade de velocidade no grupo i , na posição z e direção Θ sobre o eixo Z ($\mu = \cos \Theta$).

$$f_i(z, \mu) = \tilde{f}_i(\mu) \exp[iBz] , \quad (3.4.2.2)$$

O procedimento usado para obter a solução da expressão acima encontra-se bem detalhado na seção 6 do manual do sistema HAMMER-TECHNION / 5 /.

Nas faixas de energias rápida e epitérmica, o coeficiente de difusão para os três macrogrupos é calculado na subrotina EDIT12, usando a expressão :

$$D = \frac{\sum_i J_i \Delta u_i}{B \left[\sum_i F_i \Delta u_i \right]} \quad (3.4.2.3)$$

onde : $B =$ "buckling" (dá a curvatura do fluxo);

: $F_i =$ fluxo médio no grupo i para a célula homogeneizada;

: $J_i =$ corrente no grupo i para a célula homogeneizada.

A soma em i refere-se aos grupos compreendidos nos intervalos de energia definidos pelos "break-point" escolhidos.

Como no cálculo de D_{th} , F_i e J_i referem-se aos momentos de ordem zero e um, respectivamente, da expansão em polinômios de Legendre da expressão :

$$(iB\mu + \Sigma) \tilde{f} = \tilde{s}, \quad (3.4.24)$$

sendo \tilde{f} e \tilde{s} , as transformadas de Fourier do fluxo e da fonte de nêutrons, respectivamente.

Estas grandezas são desenvolvidas na seção 7.E da referência / 5 /.

Contrariamente ao que ocorre no macrogrupo térmico, quanto mais energético for o macrogrupo, mais sensível ele será ao valor de "buckling".

Na Tabela 3.4.2.1 procura-se ilustrar a influência individual das grandezas envolvidas no cálculo do coeficiente de difusão, para uma célula unitária do tipo A1 identificada na seção 2.1 deste trabalho, apresentando os valores dos fluxos $[F(N)]$ e das correntes $[C(N)]$ de nêutrons para cada um dos 54 grupos do MUFT, tal como são impressos na subrotina ED12P. Estas grandezas são calculadas na subrotina CLAPS para a célula unitária homogeneizada.

Os valores de $F(N)$ e $C(N)$ para um macrogrupo correspondem à soma de todos os grupos que constituem este macrogrupo. O valor correspondente de D , para o primeiro macrogrupo (o mais energético), é obtido dividindo o valor da corrente no macrogrupo pelo produto do fluxo e do "buckling", que no caso desta célula é de $93,70 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-2}$. As grandezas q_h (densidade de moderação do hidrogênio), q (densidade de moderação dos outros núclídeos da célula) e ρ (contribuição devido ao hidrogênio no 1º momento da

densidade de emissão s_1), calculadas no grupo, serão usadas para a determinação do fluxo e corrente do grupo subsequente.

Tabela 3.4.2.1 –
Fluxo e corrente de nêutrons (por unidade de letargia) em
energias epitérmica e rápida – Célula $UO_2-2\%PuO_2(8\%PuO_2)$

GRUPO	FLUXO	CORRENTE	GRUPO	FLUXO	CORRENTE
1	0,287277	0,078191	28	0,920293	0,059619
2	0,734437	0,19656	29	0,917876	0,059469
3	1,520414	0,381736	30	0,890327	0,058052
4	2,264301	0,493231	31	0,881852	0,056926
5	3,476982	0,673602	32	0,861575	0,054176
6	4,553674	0,995446	33	0,847029	0,055392
7	3,889647	0,744677	34	0,771102	0,047109
8	4,258346	0,717005	35	0,862684	0,055986
9	4,041229	0,566241	36	0,796378	0,050013
10	3,922015	0,453072	37	0,802956	0,052402
11	4,547718	0,587834	38	0,761073	0,046685
12	3,682262	0,480217	39	0,770182	0,047367
13	2,501529	0,234503	40	0,771937	0,050340
14	3,110256	0,292822	41	0,670442	0,040648
15	2,678760	0,258827	42	0,719802	0,047478
16	2,285638	0,218585	43	0,715039	0,046466
17	2,005246	0,186456	44	0,727437	0,047777
18	1,787002	0,160878	45	0,579760	0,034486
19	1,613392	0,140543	46	0,626242	0,041009
20	1,466450	0,123154	47	0,682755	0,045329
21	1,320763	0,105095	48	0,686573	0,045741
22	1,183278	0,090565	49	0,684335	0,045862
23	1,089923	0,078481	50	0,679134	0,045663
24	1,030136	0,072169	51	0,672223	0,045281
25	0,992008	0,066052	52	0,642572	0,042759
26	0,964116	0,062434	53	0,523985	0,032557
27	0,942003	0,060350	54	0,590078	0,038977

O coeficiente de difusão, nos quatro macrogrupos padrão do HAMMER-TECHNION, para a mesma célula acima citada, pode ser visto na Tabela 3.4.2.2. Os fluxos e respectivas correntes de nêutrons, integrados e ponderados nos limites

de energia correspondentes aos "break-point" padrão (25-10-25), também são apresentados nesta Tabela.

Tabela 3.4.2.2
Coeficiente de difusão calculado para células
de UO_2 -2% PuO_2 - "pitch" = 0,80 polegadas.

MACROGRUPO	FLUXO	CORRENTE	COEF. DIFUSÃO
1 de 4	7,237081	1,324939	1,89131+00
2 de 4	9,227617	0,877136	9,81991-01
3 de 4	7,133922	0,459979	6,66101-01
4 de 4	3,068700	0,072751	2,44917-01

Na elaboração das Tabelas 3.4.2.1 e 3.4.2.2, aproveitou-se uma execução do código HAMMER-TECHNION, onde dividiu-se a região combustível da célula em dez sub regiões, considerando-se também outras duas regiões do revestimento e moderador respectivamente. Neste caso / 71 / utilizou-se o método de Carlvik para cálculo do espectro de nêutrons térmicos e "up-scattering" para todas as regiões . As bibliotecas de dados nucleares térmica e epitérmica foram processadas utilizando o arquivo de dados nucleares básicos JENDL-2 .

O comportamento do coeficiente de difusão da célula com a razão de moderação e concentração de óxido de plutônio no combustível pode ser verificado no capítulo 5.

3.4.3. - Secção de Choque de Absorção (Σ_a) . -

Na região de energia térmica, esta grandeza é definida como a razão entre a taxa de absorção térmica da célula unitária integrada sobre todos os IXP grupos térmicos e o fluxo térmico integrado nos mesmos grupos. É calculada e impressa na subrotina THEFT, segundo a expressão abaixo :

$$\Sigma_a = \frac{\sum_{i=1,29} V(i) XA(i) F_0(i) DV(i)}{\sum_{i=1,29} V(i) F_0(i) DV(i)} \quad (3.4.3.1)$$

A única grandeza que aparece na expressão 3.4.3.1, e que não foi definida na seção precedente, é $XA(i)$ que é obtida pela expressão :

$$XA(i) = \frac{\sum_N XAM(N,i) F(N,i)}{\sum_N F(N,i)} \quad , \quad (3.4.3.2)$$

onde $XAM(N,i)$ refere-se à seção de choque de absorção na região N e grupo de energia i . É calculada na subrotina LINK2 como sendo a soma, sobre todos os núcleos, dos produtos da densidade atômica $CONCTA(J,M)$ do núcleo J na mistura M e da seção de choque de absorção $XAT(J,i)$ desse núcleo no grupo de energia i . $F(N,i)$ é o fluxo de nêutrons de energia i na região N .

Para os três macrogrupos não térmicos, a seção de choque de absorção homogeneizada e colapsada é obtida respeitando-se os limites de energia definidos pelos "break-point" escolhidos. Seu valor é encontrado na subrotina EDIT12, após o procedimento de homogeneização realizado na subrotina CLAPS.

Na Tabela 3.4.1.1, anteriormente apresentada na seção 3.4.1, pode se verificar que o valor da seção de choque de absorção da célula unitária, homogeneizada e colapsada em quatro macrogrupos de energia, é inversamente proporcional à razão de moderação da célula. Isto está de pleno acordo com a expressão 3.4.3.2 acima, uma vez que, quanto mais moderada a célula, mais diluído estará o combustível (absorvedor), o que implica numa redução no valor da grandeza $XAM(N,i)$.

No capítulo 5 verifica-se o comportamento desta grandeza quando se varia a

concentração do nuclídeo Pu-240 na célula, o qual, como já foi dito, possui uma forte ressonância próxima à região de energia térmica.

3.4.4. – Secção de Choque de Fissão (Σ_f). –

A grandeza de interesse neste estudo é o produto da secção de choque de fissão (Σ_f) e o número médio de nêutrons produzidos por fissão (ν), homogeneizados na célula unitária. Seu valor é obtido semelhante à Σ_a estudada na seção precedente, pela expressão :

$$[\nu\Sigma_f](I) = \frac{\sum_{i=1,j} \nu(i)\Sigma_f(i)F(i)\Delta u(i)}{\sum_{i=1,j} F(i)\Delta u(i)}, \quad (3.4.4.1)$$

onde : I – refere-se ao macrogrupo correspondente (I=1 a 4);

: i – refere-se ao grupo da estrutura de grupos finos; no caso da grandeza térmica, i vai até 29 (sendo colapsados no macrogrupo I=4), e no caso dos macrogrupos epitérmicos e rápido, i vai até 54 (dividindo-se em três macrogrupos I = 1 a 3);

: F(i) – é o fluxo médio de nêutrons no grupo i para a célula homogeneizada;

: $\Delta u(i)$ – intervalo de letargia correspondente ao grupo i .

O valor de $\nu\Sigma_f(I)$, para o macrogrupo térmico, é obtido na subrotina THEFT, e para os outros três macrogrupos não térmicos, seu valor é obtido na subrotina EDIT12, após o tratamento de fuga, realizado pela subrotina SLODON, e a homogeneização na subrotina

CLAPS. A subrotina responsável em editar esses valores é a ED12P.

Como as grandezas envolvidas no cálculo das secções de choque homogeneizadas e colapsadas em poucos grupos, apresentadas nas três últimas secções, variam ao longo da célula, em função da região considerada, na Tabela 3.4.4.1 são apresentados os valores de $\nu\Sigma_f$, Σ_a e D colapsados em quatro macrogrupos, para cada sub região da célula unitária. Neste caso apresentado / 71 /, dividiu-se a região combustível em dez sub regiões (1 a 10, indo do centro da vareta para a sua periferia); a região 11 representa o revestimento (neste caso Zircaloy-2) e a região 12 refere-se ao moderador (água leve).

Pode-se obter os valores destas grandezas homogeneizadas na célula unitária, os quais servirão para alimentar o programa CITATION no cálculo de difusão, fazendo-se a soma, sobre todas as regiões, dos produtos da secção de choque na região e o respectivo fluxo de nêutrons e dividindo-se o resultado encontrado pela soma de todos os fluxos neutrônicos de cada região, ou seja :

$$\Sigma_x(i) = \frac{\sum_{\mathbb{N}} x(\mathbb{N}, i) * FL(\mathbb{N}, i)}{\sum_{\mathbb{N}} FL(\mathbb{N}, i)} , \quad (3.4.4.2)$$

Na expressão acima, Σ_x refere-se à secção de choque da reação x específica .

A subrotina EDIT4 fornece os valores dos parâmetros colapsados em poucos grupos e homogeneizados em cada região da célula. Os valores destes parâmetros homogeneizados na célula toda são fornecidos pela subrotina XTRAED.

Os valores ilustrados na Tabela 3.4.4.1 foram obtidos com a versão do código HAMMER-TECHNION que possui o "cut-off" térmico original. Cálculos realizados com a versão que possui o novo "cut-off" não apresentaram diferenças significativas em relação a

estes aqui mostrados. Todavia, na seção 3 do capítulo 5, resultados com ambas as versões são confrontados.

Tabela 3.4.4.1
 Parametros homogeneizados por região e colapsados em quatro
 macrogrupos - Célula com 2% PuO₂ - pitch=0.80 polegadas.

REG.	GRU	FLUXO-VOL	COEF.DIP.	K-SEC.ABS.	ν.X-SEC.FIS.
1	1	0,282606	1,577996	0,010141	0,025729
	2	0,349863	1,000784	0,006184	0,002496
	3	0,247579	0,756109	0,059830	0,035911
	4	0,165587	0,469782	0,483590	0,865586
2	1	0,280308	1,578530	0,010145	0,025744
	2	0,347809	1,000051	0,006200	0,002497
	3	0,248746	0,751220	0,061530	0,036170
	4	0,165587	0,467880	0,486933	0,871416
3	1	0,278333	1,578828	0,010147	0,025753
	2	0,346158	0,999435	0,006213	0,002498
	3	0,249689	0,746179	0,063269	0,036374
	4	0,172326	0,465886	0,490464	0,877570
4	1	0,276569	1,579105	0,010149	0,025761
	2	0,344687	0,998888	0,006224	0,002499
	3	0,250545	0,740476	0,065221	0,036560
	4	0,176013	0,463794	0,494205	0,884081
5	1	0,274935	1,579375	0,010150	0,025768
	2	0,343331	0,998382	0,006235	0,002499
	3	0,251360	0,733802	0,067493	0,036737
	4	0,179960	0,461582	0,498197	0,891020
6	1	0,273393	1,579643	0,010152	0,025776
	2	0,342054	0,997906	0,006245	0,002500
	3	0,252149	0,725718	0,070231	0,036905
	4	0,184224	0,459221	0,502499	0,898492
7	1	0,271908	1,579912	0,010154	0,025783
	2	0,340825	0,997453	0,006255	0,002500
	3	0,252913	0,715448	0,073709	0,037067
	4	0,188881	0,456668	0,507203	0,906652
8	1	0,270479	1,580184	0,010156	0,025791
	2	0,339644	0,997018	0,006265	0,002501
	3	0,253666	0,701319	0,078552	0,037223
	4	0,194075	0,453846	0,512463	0,915766

Tabela 3.4.4.1 (continuação) .-

REG.	GRU	FLUXO-VOL	COEF.DIF.	X-SEC.ABS.	ν X-SEC.FIS.
9	1	0,269113	1,580461	0,010158	0,025799
	2	0,338520	0,996598	0,006274	0,002501
	3	0,254413	0,677747	0,087119	0,037367
	4	0,200080	0,450608	0,518583	0,926354
10	1	0,267794	1,580751	0,010160	0,025307
	2	0,337416	0,996194	0,006283	0,002502
	3	0,254964	0,587884	0,131557	0,037450
	4	0,207659	0,446496	0,526481	0,939995
11	1	0,655189	2,343533	0,000344	0,000000
	2	0,839629	1,061206	0,001022	0,000000
	3	0,649548	1,163634	0,003687	0,000000
	4	0,555365	1,425380	0,005973	0,000000
12	1	3,836455	2,121100	0,000372	0,000000
	2	4,957681	0,959036	0,000010	0,000000
	3	3,968348	0,600723	0,000831	0,000000
	4	3,824290	0,182182	0,015176	0,000000

Conforme previsto teoricamente, na região combustível, o fluxo de nêutrons rápidos (macrogrupos 1 e 2) possui seu maior valor no centro deste, decrescendo suavemente a medida que se caminha para a sua periferia. Efeito oposto é verificado para os fluxos de nêutrons térmico e epitérmico (macrogrupo 3 e 4). A secção de choque de absorção e a quantidade $\nu\Sigma_f$, independentemente da energia do nêutron, crescem suavemente conforme se afasta do centro do combustível. Enquanto o coeficiente de difusão do primeiro macrogrupo aumenta do centro para fora do combustível, para os outros três macrogrupos o resultado é invertido.

O comportamento das secções de choque homogeneizadas apresentadas neste trabalho é bastante semelhante ao verificado no estudo desenvolvido por Liikala / 48 /, para as células com 2%PuO₂(8%Pu240), embora no seu trabalho ele tenha usado a biblioteca de dados nucleares básicos ENDF/B-II.

Outro trabalho desenvolvido com o intuito de estudar o comportamento dos parâmetros celulares homogeneizados e colapsados em poucos grupos de energia, foi realizado por Newman / 52 /. Ressaltamos aqui a observação feita por este pesquisador, que aponta uma discrepância no cálculo do espectro de nêutrons térmicos com dependência energética e espacial, usando o programa THERMOS com núcleo de espalhamento de Nelkin para água leve. Este efeito, dentre outros, superestima a depressão do fluxo ao redor da energia de ressonância de 0,3 eV do Pu-239, e conseqüentemente subestimando a taxa de reação de fissão deste nuclídeo na região de energias térmicas, cujo efeito pode ser mais acentuado conforme a concentração de PuO₂ na célula.

CAPÍTULO 4 : FUNDAMENTOS TEÓRICOS .-

Este capítulo é designado para apresentação e observações das principais características físicas e aspectos neutrônicos dos núclídeos mais relevantes nos experimentos críticos estudados que contém misturas de óxidos. O comportamento individual dos isótopos do urânio : U-234, U-235 e U-238, e dos isótopos do plutônio : Pu-239, Pu-240, Pu-241 e Pu-242, bem como do núclídeo amerício-241 , é analisado nos gráficos das secções de choque em função da energia do nêutron. Para os núclídeos fisséis U-235, Pu-239 e Pu-241, o parâmetro α (razão entre a taxa de captura e a taxa de fissão) na região de energia térmica até a energia de 2,0 eV também é mostrado . Esta análise preliminar dos parâmetros neutrônicos é de suma importância para a perfeita compreensão dos resultados obtidos e apresentados neste trabalho.

4.1 - Isótopos do Urânio :

São três os de interesse nos experimentos críticos analisados : U-234, U-235 e U-238 , sendo que estes estão inicialmente presentes nos combustíveis de dióxido de urânio (UO_2) . Nas células com urânio natural a composição isotópica destes núclídeos é aproximadamente 99,2% de U-238, 0,72% de U-235 e 0,006% de U-234.

4.1.1 - Urânio-234 ($T_{1/2} = 2.45 \times 10^5$ anos) :

Pela captura neutrônica o U-234 pode formar U-235 e após longo período de resfriamento, uma pequena quantidade de U-234 pode ser produzida pela emissão alfa do Pu-238.

A Figura 4.1.1 ilustra a secção de choque total, de espalhamento elástico, de fissão e de captura (n,gama) como função da energia do nêutron.

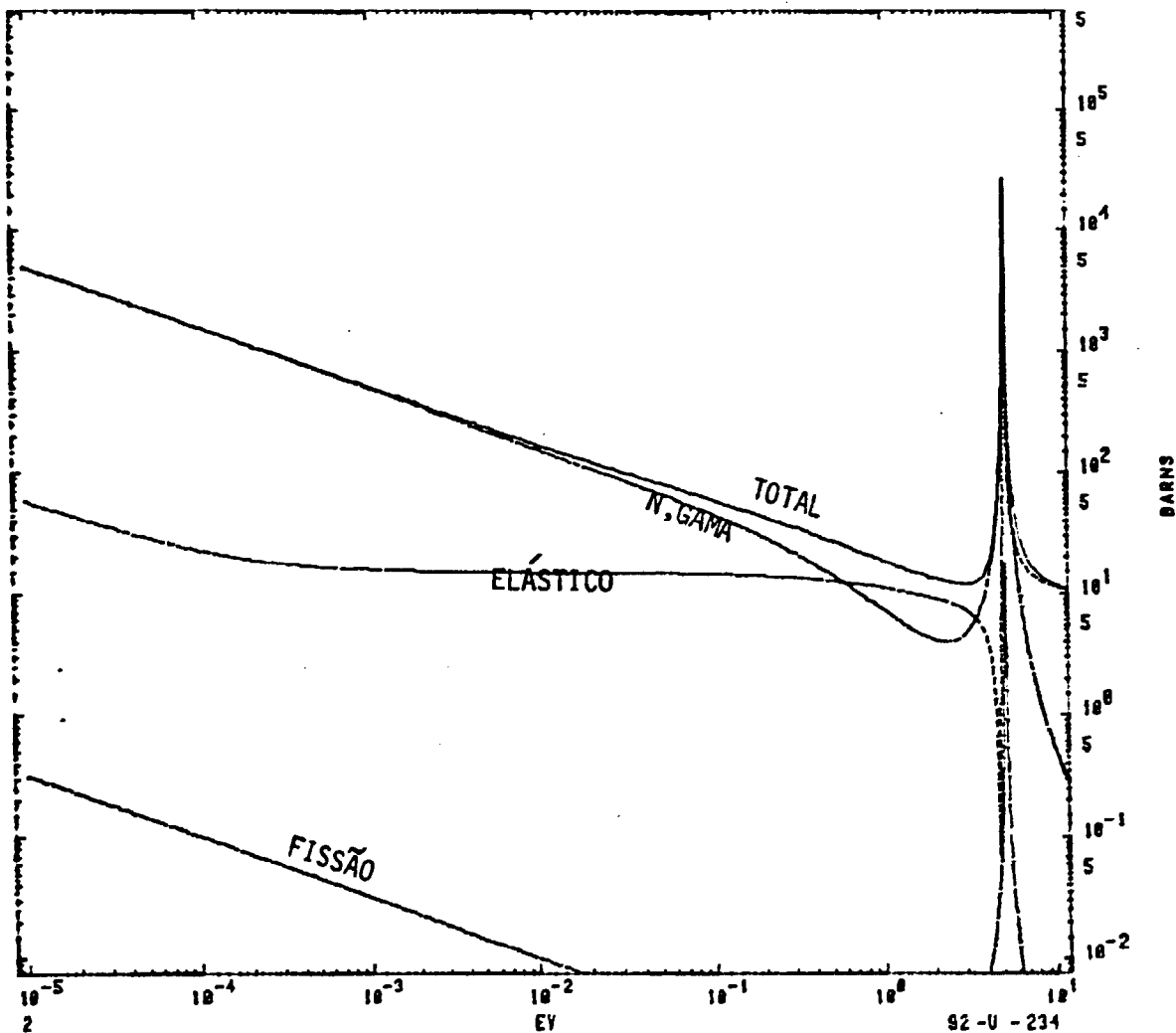


Figura 4.1.1 – Secções de choque X energia : U-234

Podem-se notar que a reação mais importante deste nuclídeo na faixa de energia considerada na Figura 4.1.1 é a reação de captura (n,gama), passando a competir com o espalhamento elástico a partir de 0,6 eV. Uma ressonância estreita é verificada em torno da energia de 5 eV.

4.1.2 – Urânio-235 ($T_{1/2} = 7.04 \times 10^8$ anos) :

Este isótopo sofre transmutação devido à absorção neutrônica, fisionando e formando U-236. A Figura 4.1.2 mostra o comportamento das secções de choque para as reações mais importantes na região de energia térmica, para este nuclídeo.

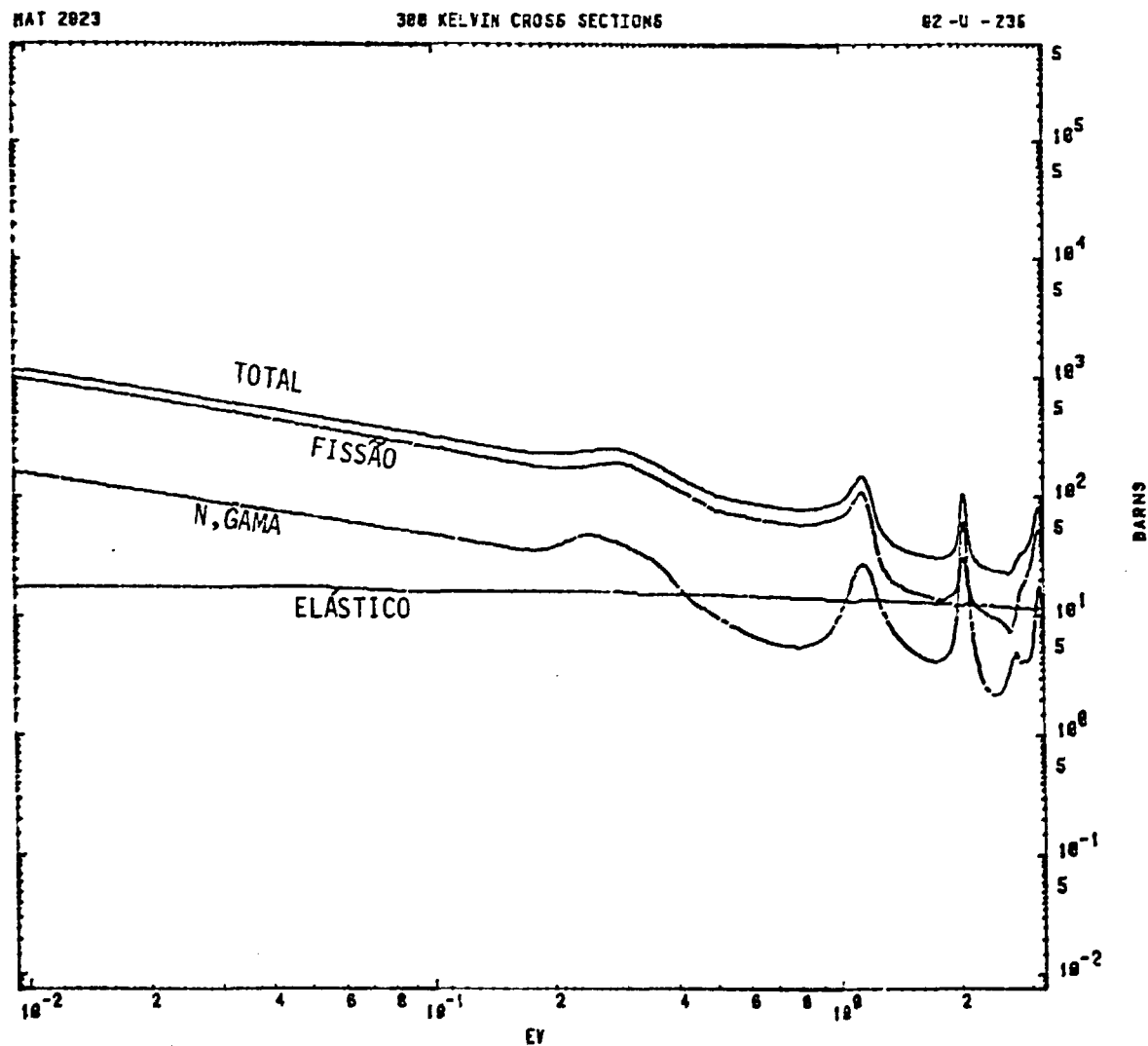


Figura 4.1.2 – Secções de choque X energia : U-235

Na região de energias térmicas a reação mais importante deste nuclídeo é a fissão. As curvas de secção de choque de fissão e de captura (n,gama) decrescem contínua e suavemente com o aumento da energia do nêutron até cerca de 0,2 eV; a partir de cerca de 1 eV nota-se várias pequenas e estreitas ressonâncias. A partir de 100 eV o espalhamento elástico passa a prevalecer sobre as outras reações.

No gráfico da razão entre a taxa de captura pela taxa de fissão, nenhuma tendência preferencial da curva é verificada, sendo que a mesma apresenta dois pontos de elevação, um em torno da energia de 0,36 eV, onde a curva atinge o valor máximo de 0,28, e a outra elevação ocorre em torno da energia de 1,36 eV, onde a curva atinge o valor máximo de 0,32, coincidindo com o valor de α apresentado pelo nuclídeo Pu-239 nesta energia.

4.1.3 – Urânio-238 ($T_{1/2} = 4.47 \times 10^9$ anos) :

É o elemento que se apresenta em maior quantidade nos combustíveis nucleares (cerca de 10^{-2} átomos por barn-cm); esta quantidade diminui com a operação do reator, permanecendo constante durante o "shutdown".

Este nuclídeo é o maior absorvedor na região de energias epitérmicas; com esta reação, dá origem aos isótopos do plutônio como o Pu-239 e Pu-240, de suma importância nas análises desenvolvidas neste trabalho. Em todas as células aqui estudadas, utilizou-se o U-238 fornecido pela biblioteca JENDL-2, pois, conforme apontado na referência / 95 /, a captura epitérmica deste nuclídeo aparece superestimada na biblioteca ENDF/B-IV; por este motivo, esta reação é reduzida de cerca de 1 a 2% na biblioteca ENDF/B-V em relação à versão anterior ENDF/B-IV.

Na Figura 4.1.3 verifica-se que a reação mais importante do U-238 na região de energia térmica é o espalhamento elástico, sendo acompanhado pela captura (n,gama).

nêutrons de alta energia (acima de 0,8 MeV) podem induzir fissão neste nuclídeo, e

4.2 – Isótopos do Plutônio :

Os isótopos do plutônio considerados nos experimentos críticos deste trabalho são : Pu-239, Pu-240, Pu-241 e Pu-242 , concentrados na forma de mistura de óxidos UO_2 - PuO_2 .

Dois isótopos do plutônio, Pu-239 e Pu-241, apresentam fissão térmica significativa. Nos materiais pouco irradiados ou combustíveis reprocessados, os isótopos do plutônio são importantes emissores de nêutrons, sendo que os isótopos Pu-239 e Pu-240 emitem um número significativo de partículas alfa.

A composição isotópica do plutônio nas varretas combustíveis varia com a concentração de PuO_2 na vareta, e foi fornecida no capítulo 2 para as células aqui estudadas.

4.2.1 – Plutônio-239 ($T_{1/2} = 2.41 \times 10^4$ anos) :

Este isótopo é formado principalmente pelo decaimento beta do Np-239 formado pela absorção do Np-238 ou decaimento beta do U-239. Uma pequena quantidade de Pu-239 pode ainda ser produzida pela captura neutrônica no Pu-238.

Como ocorre com o U-235, o comportamento da secção de choque de fissão e de captura (n, γ) é continuamente descendente até cerca de 10^{-1} eV; até esta energia a reação mais importante é a fissão. Uma ressonância relativamente larga aparece próximo à energia de 0,3 eV. O comportamento das secções de choque para as reações mais importantes na região de energia térmica é ilustrado na Figura 4.2.1 .

O valor de α do Pu-239, ilustrado na seção 4.4, aumenta até próximo à energia de 0,28 eV; após esta energia este parâmetro apresenta um comportamento descendente. Dos núclídeos de relativa significância é o que no geral apresenta maior valor de α , cerca de 0,70 no ponto de maior elevação .

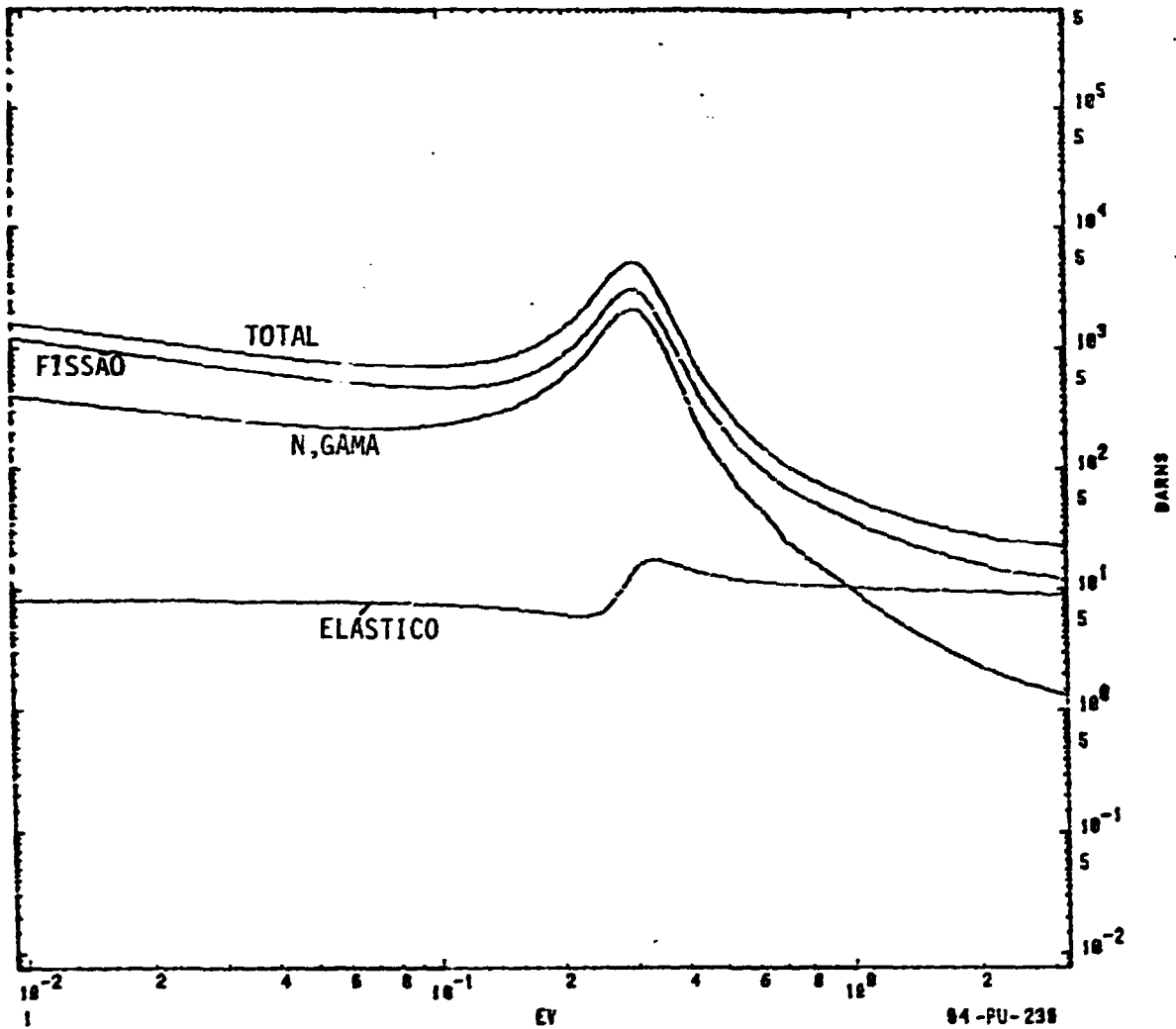


Figura 4.2.1 – Secções de choque X energia : Pu-239

4.2.2 – Plutônio-240 ($T_{1/2} = 6.55 \times 10^3$ anos) :

É formado principalmente pela captura neutrônica do Pu-239 e desaparece também por meio da captura neutrônica para formar Pu-241 .

Na região de energia térmica, Figura 4.2.2, a reação mais importante é a captura

(n,gama), que também apresenta um comportamento descendente até próximo à energia de 10^{-1} eV. Uma ressonância gigante é perceptível ao redor da energia de 1,0 eV, a qual provoca uma depressão no fluxo de nêutrons ao redor desta energia. A fissão na região de energia térmica pode ser desprezível em comparação às fissões dos elementos considerados físseis : Pu-239, Pu-241 e U-235. Quanto maior for a quantidade de Pu-240, maior será a autoblindagem no fluxo de nêutrons na energia de ressonância deste isótopo .

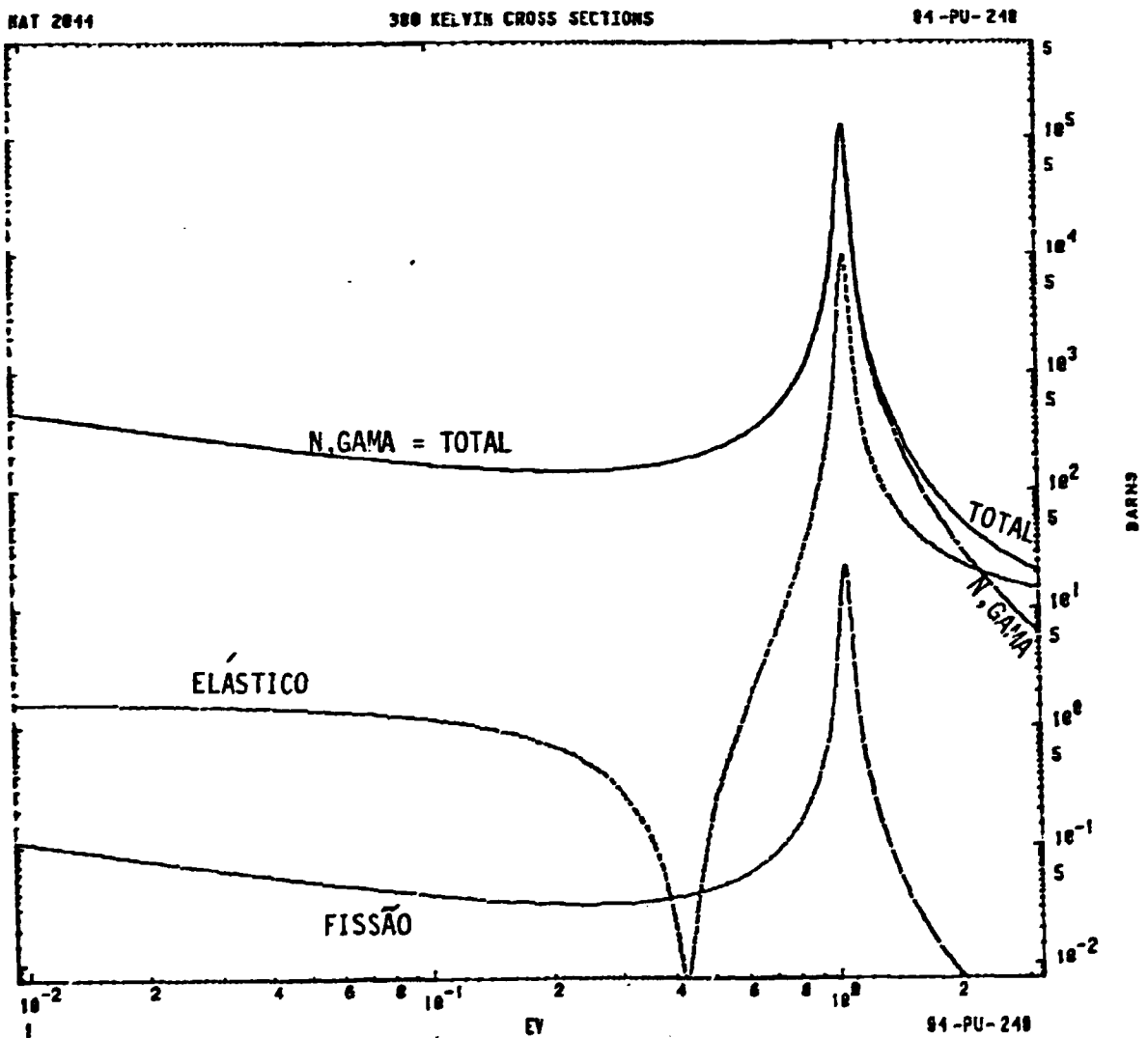


Figura 4.2.2 – Secções de choque X energia : Pu-240

4.2.3 – Plutônio-241 ($T_{1/2} = 14.7$ anos) :

É formado pela captura neutrônica do Pu-240 e desaparece via fissão, via decaimento beta formando Am-241, decaimento alfa formando U-237 ou ainda, em pequena quantidade, via captura neutrônica produzindo Pu-242.

A figura 4.2.3 mostra que, na região de energia térmica, a reação mais importante deste nuclídeo é a fissão .

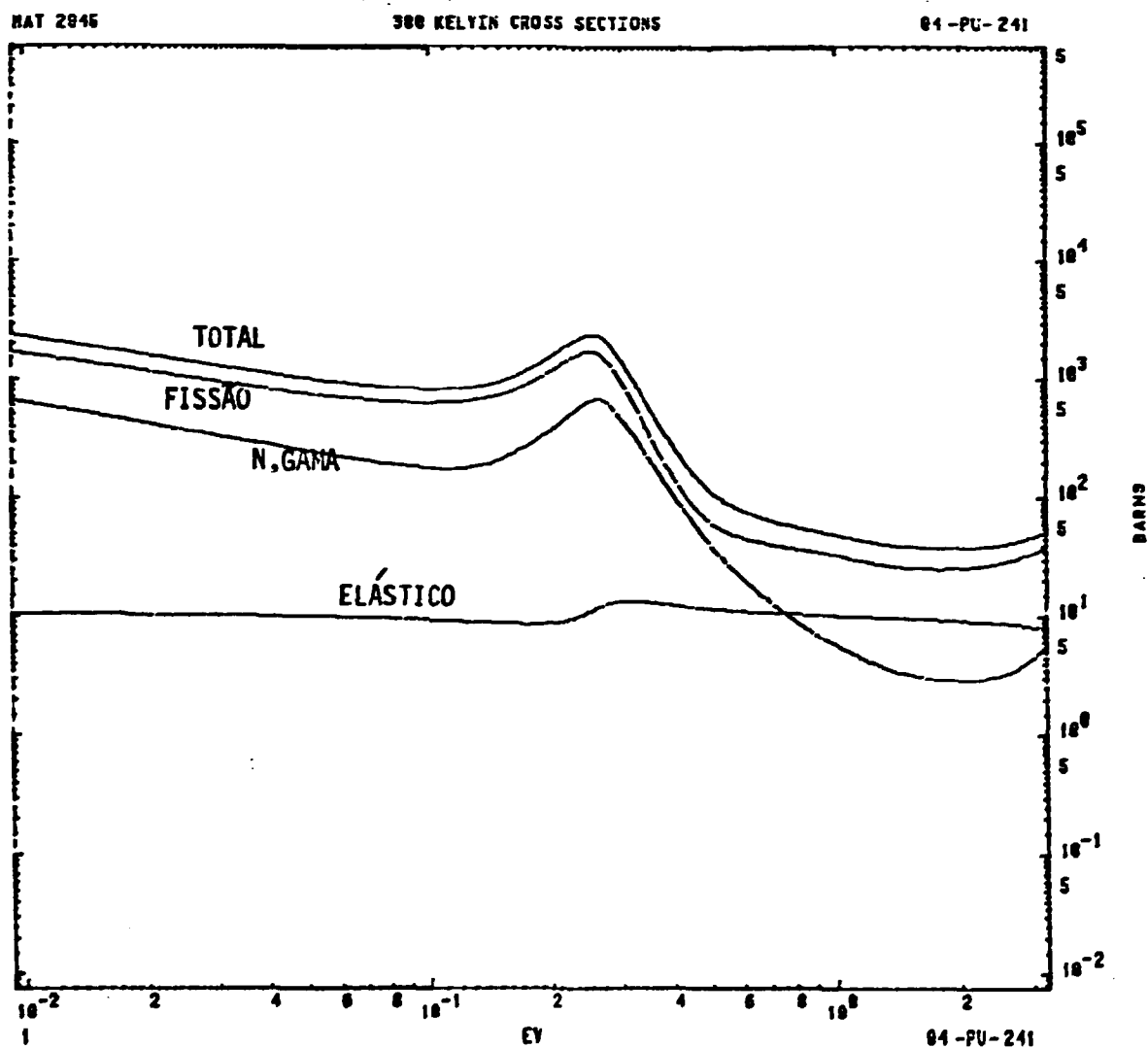


Figura 4.2.3 – Seções de choque X energia : Pu-241

Semelhante ao isótopo Pu-239, o Pu-241 apresenta uma pequena e larga ressonância em torno da energia de 0,26 eV. A razão entre a taxa de captura e a taxa de fissão (α) para o isótopo Pu-241, ilustrada na seção 4.4, decresce até a energia de 0,08 eV, voltando a aumentar até a energia de cerca de 0,40 eV, e acima desta energia o valor de α decresce suavemente.

O efeito do decaimento do Pu-241, nas análises de experimentos críticos, foi estudado por Uotinen / 85 /, onde nota-se, principalmente, uma redução significativa na taxa de reação térmica $\bar{\eta}f$ quando a transformação de Pu-241 em Am-241 é considerada para cálculo das densidades atômicas dos isótopos presentes no combustível.

4.2.4 – Plutônio-242 ($T_{1/2} = 3,76 \times 10^5$ anos) :

Este isótopo é produzido principalmente pela captura do Pu-241. Dos isótopos do plutônio, é o menos significativo na análise de experimentos críticos, uma vez que apresenta a mais baixa concentração atômica (cerca de 10^{-6} átomos por barn-cm), e diferentes valores desta, para o mesmo experimento, são encontrados nas referências. Este nuclídeo também apresenta uma taxa de fissão térmica relativamente desprezível.

Conforme pode ser verificado na Figura 4.2.4, para este nuclídeo, a reação mais importante na faixa de energia térmica é a reação de captura (n, γ) que apresenta um comportamento decrescente com a energia do nêutron. Uma ressonância relativamente grande é verificada em torno da energia de 1,48 eV, a qual também deverá produzir uma depressão no fluxo de nêutrons ao redor desta energia .

A Figura 4.2.4 ilustra o comportamento das secções de choque do nuclídeo Pu-242 para as principais reações presentes na região de energia térmica.

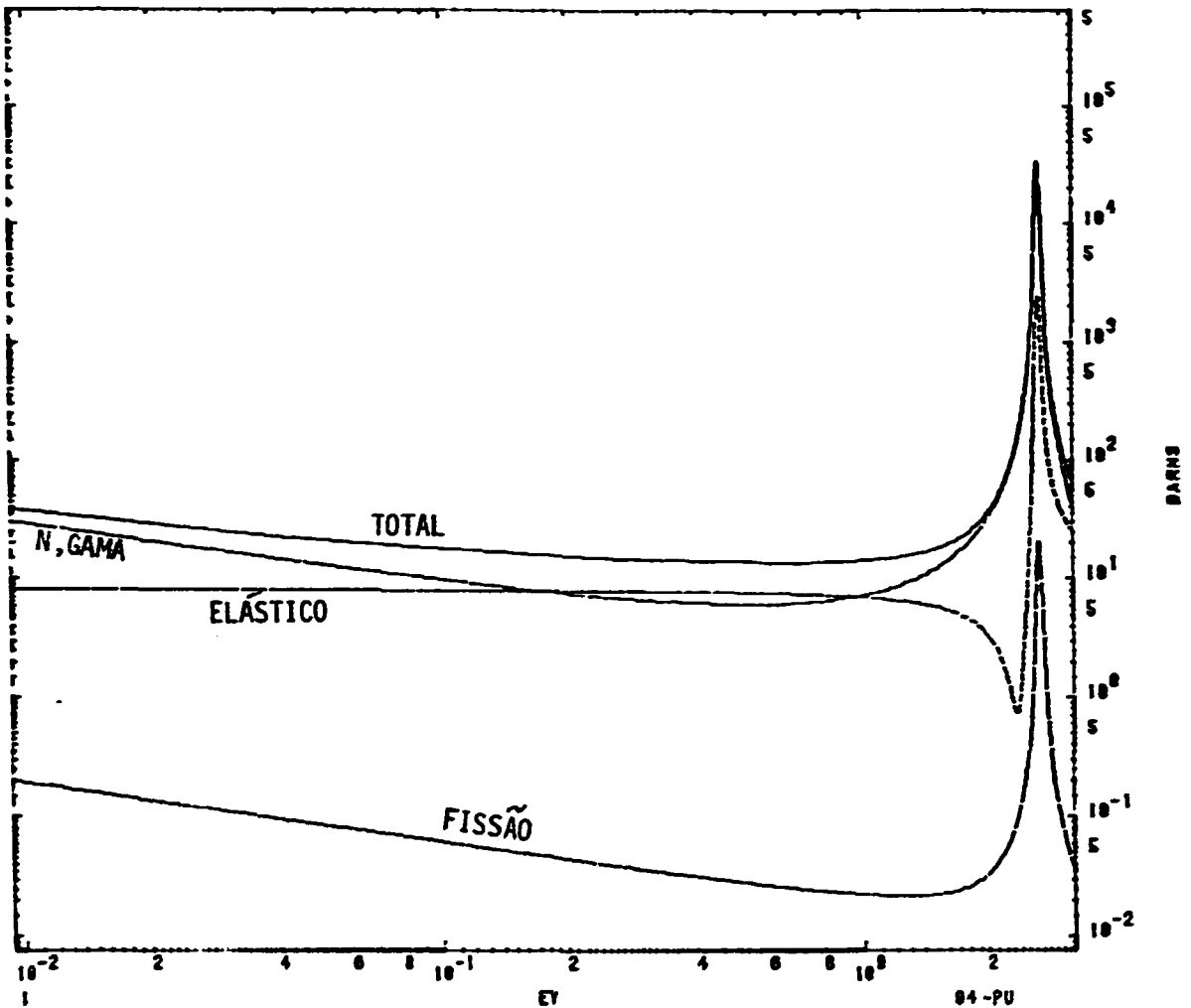


Figura 4.2.4 – Secções de choque X energia : Pu-242

4.3 – Isótopos do Amerício :

Os isótopos do amerício são importantes, uma vez que estes são precursores dos isótopos do cúrio, importantes produtores de nêutrons. Nos experimentos críticos estudados apenas o isótopo amerício-241 foi considerado.

4.3.1 – Amerício-241 ($T_{1/2} = 4.32 \times 10^{-2}$ anos) :

É formado principalmente pelo decaimento beta do Pu-241 e desaparece via captura de nêutrons formando Am-242 e pelo decaimento alfa. Em algumas situações o Am-241 pode ser um importante produtor de nêutrons pela reação (α, n).

As secções de choque de fissão e captura em função da energia do nêutron, para o Am-241, são mostradas na Figura 4.3.1 .

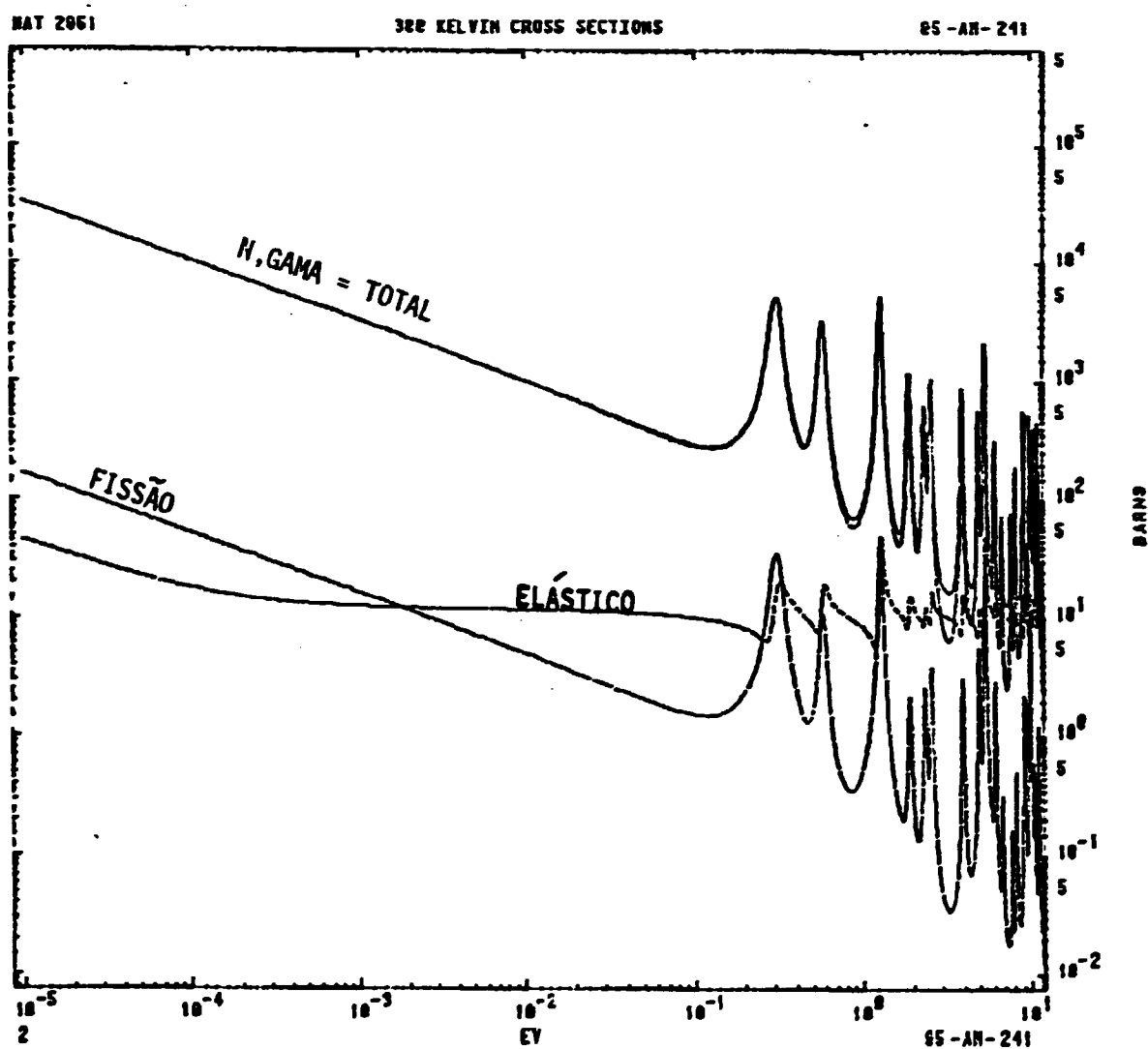


Figura 4.3.1 – Secções de choque X energia : Am-241

Como o que ocorre para os isótopos do plutônio, as curvas de fissão e captura (n,gama) em função da energia do nêutron, para este nuclídeo, apresentam um comportamento decrescente até a energia em torno de 0,1 eV; acima desta energia nota-se o surgimento de várias e pequenas ressonâncias.

4.4 – Implicações nos parâmetros celulares térmicos devido às características físicas dos isótopos do Plutônio .

Como se pode verificar nas curvas de secções de choque apresentadas neste capítulo, todos os quatro isótopos do plutônio apresentam ressonâncias próximo à região térmica. As ressonâncias aparecem em torno das energias de 0,3 eV, 1,05 eV, 0,26 eV e 1,48 eV para os isótopos Pu-239, Pu-240, Pu-241 e Pu-242 respectivamente. As ressonâncias dos isótopos Pu-239 e Pu-241 contribuem para uma autoblindagem do espectro de nêutrons térmicos em torno da energia de 0,3 eV e a grande ressonância do Pu-240 causará o mesmo efeito por volta da energia de 1,05 eV. Esse fenômeno pode ser notado na Figura 4.4.1, e também foi verificado por Leonard / 46 / para soluções de nitrato de plutônio e por Newman / 52 / para varetas de $UO_2-2\%PuO_2$.

Na Figura 4.4.4 verifica-se que o pico da curva do espectro térmico, localizado em torno da energia de 0,06 eV para as células mais estreitas, desloca-se para uma energia menor (cerca de 0,05 eV para as células mais espaçadas) a medida que se aumenta a razão de moderação da célula. Após este ponto de máximo na curva do espectro térmico, as curvas para diferentes razões de moderação se interceptam próximo à energia de 0,1 eV.

A magnitude do espectro neutrônico no ponto mais alto da curva é tanto maior quanto mais térmica for a célula. Observa-se um achatamento na curva

com correspondente aumento da largura à meia altura conforme se aperta a célula .

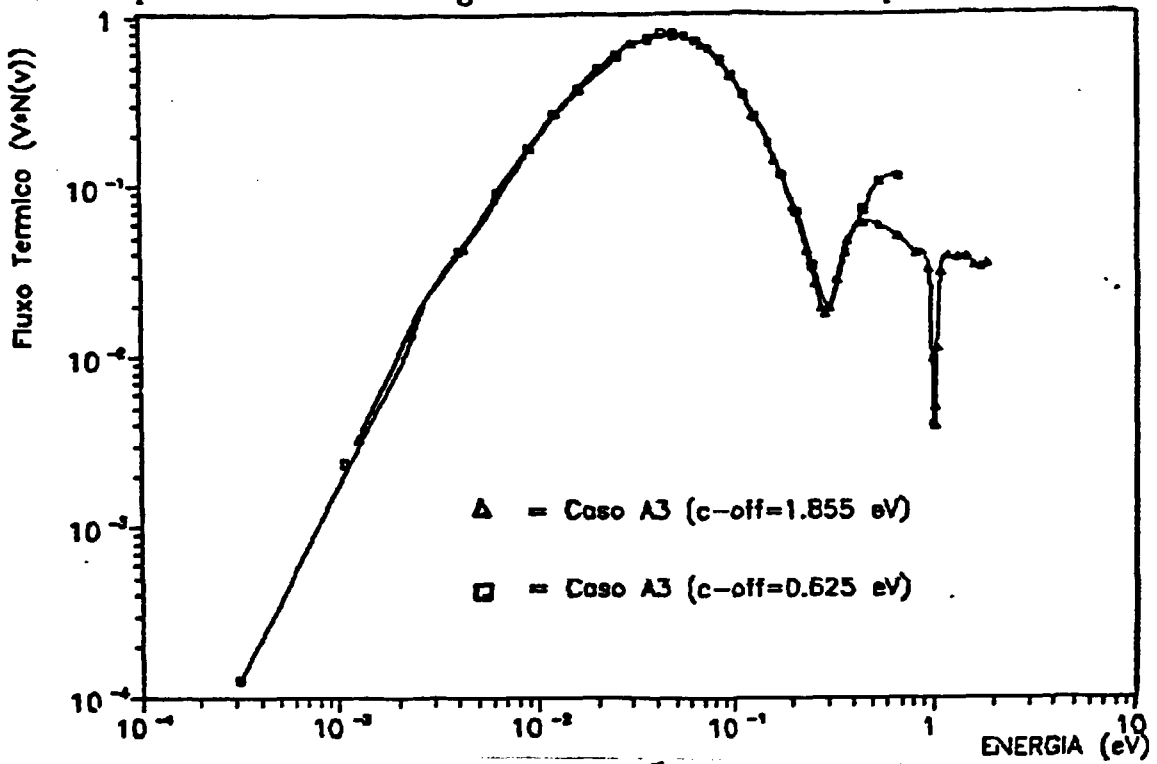


Figura 4.4.1 - Espectro térmico X energia

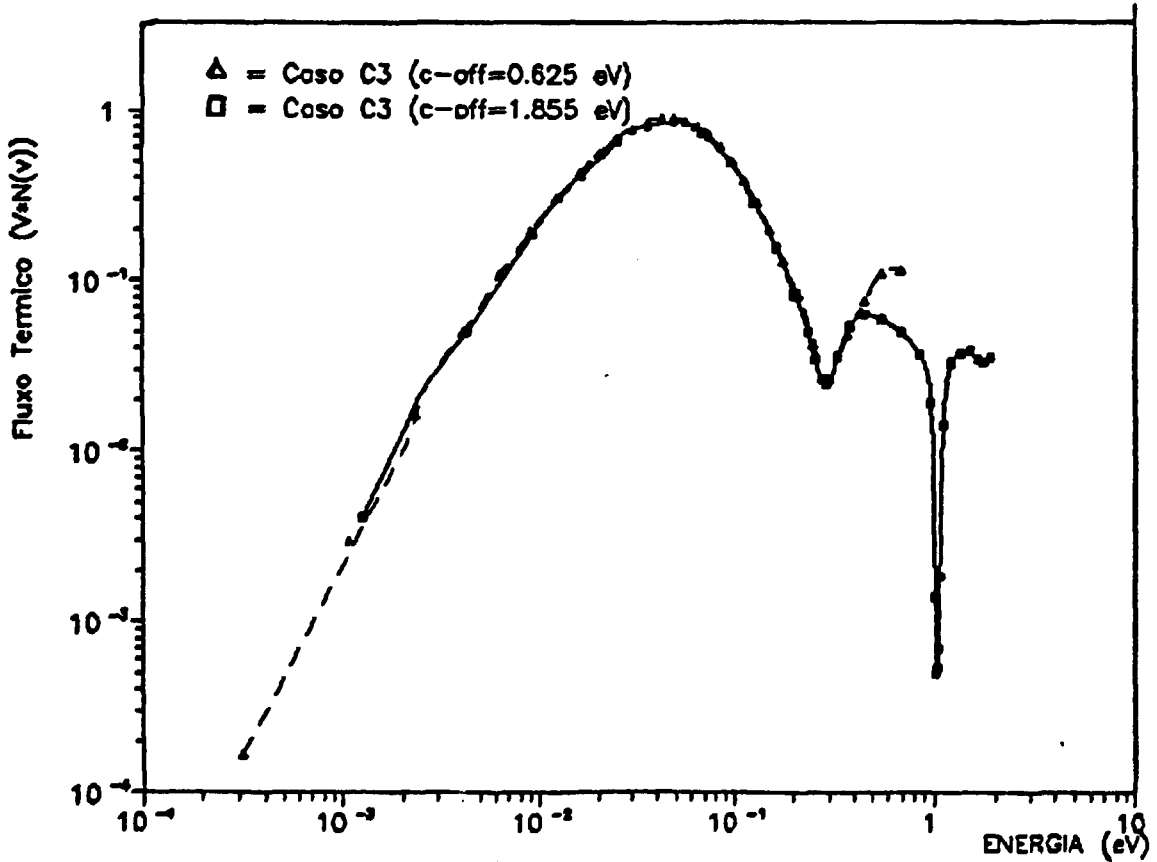


Figura 4.4.2 - Espectro térmico X energia

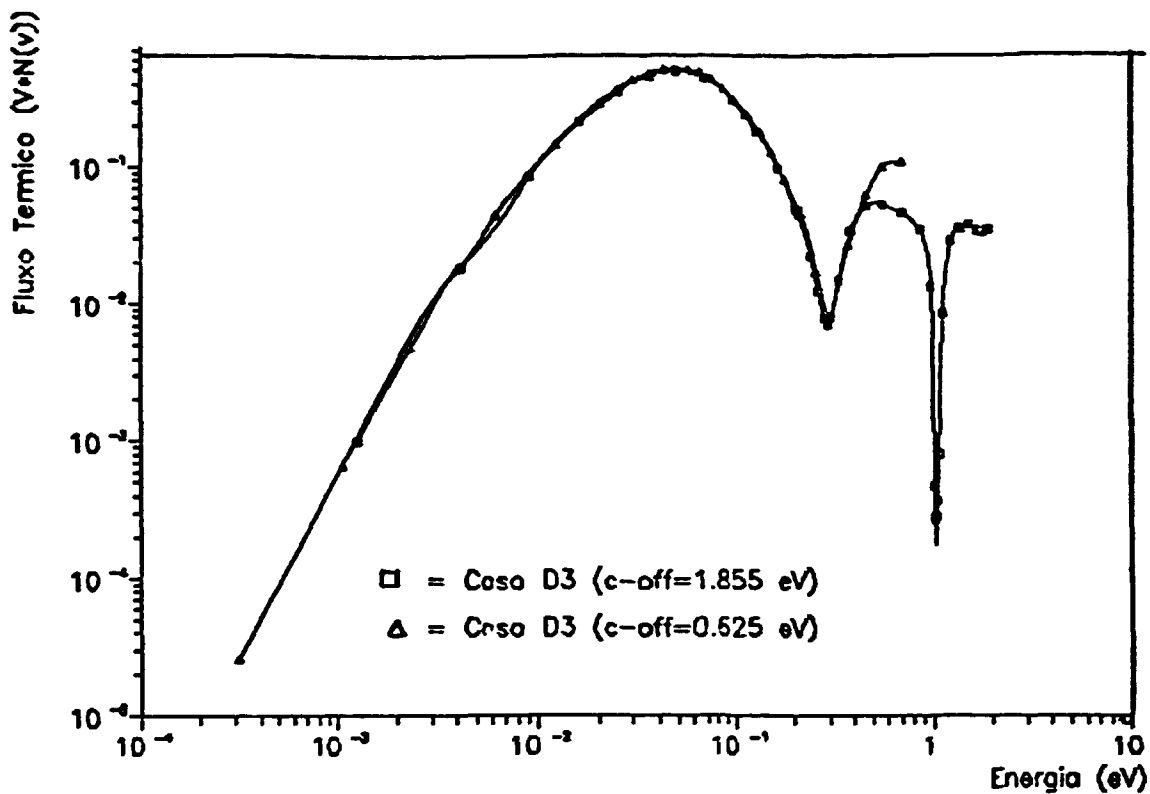


Figura 4.4.3 - Espectro térmico X energia

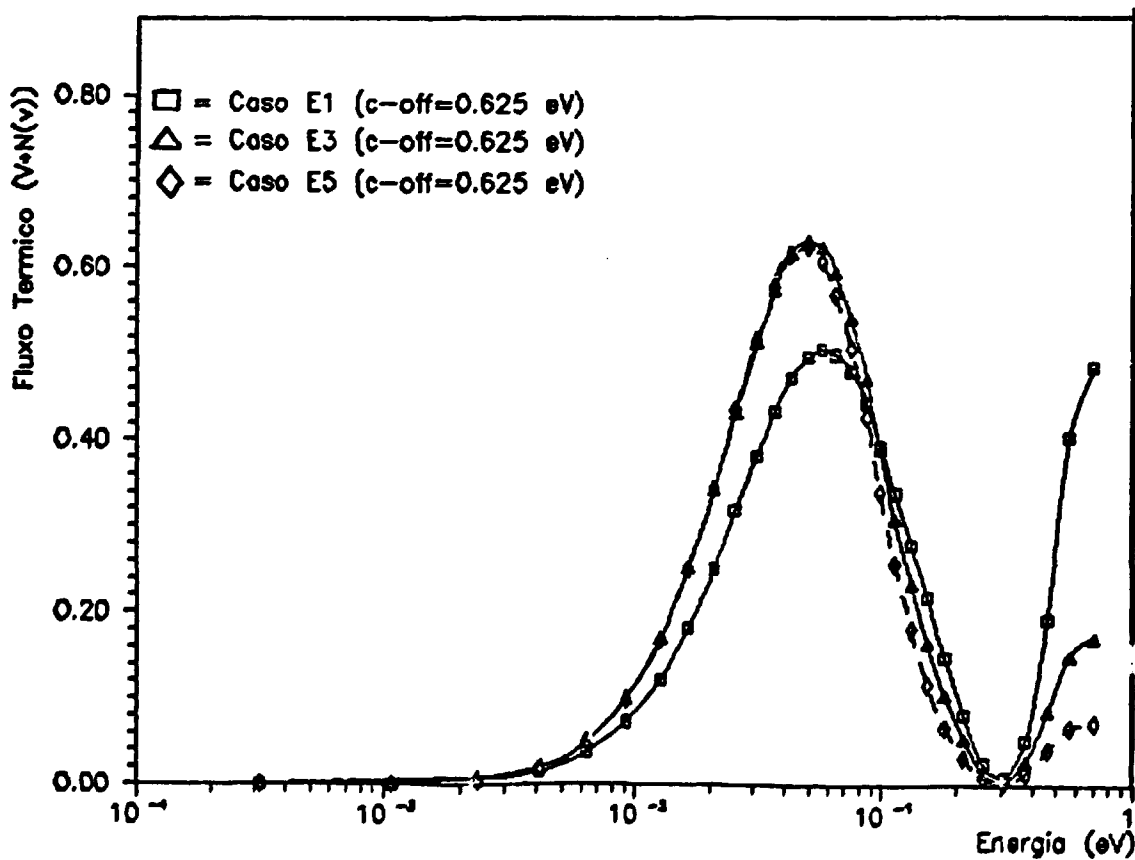


Figura 4.4.4 - Espectro térmico X energia

As depressões no espectro de nêutrons térmicos devido às ressonâncias dos isótopos do plutônio são mais significativas quanto mais térmico for o sistema.

Os três últimos parágrafos induzem ao fato de que, inversamente ao que ocorre para sistemas que contém apenas UO_2 , nos sistemas com plutônio, as constantes celulares térmicas homogeneizadas e colapsadas: D_{th} , $\Sigma_{a, th}$ e $\nu\Sigma_{f, th}$ diminuem com a razão de moderação, o mesmo acontecendo com os parâmetros integrais D-28, R-28, D-25, CON e F. O comportamento do parâmetro η_{th} deve levar em conta a razão entre a taxa de captura térmica e a taxa de fissão térmica (α_{th}). Tanto na Figura 4.4.7 como na figura 7 da referência / 44 /, pode-se verificar uma brusca queda na curva de α_{th} a partir de energia próxima à 0,3 eV até atingir energia térmica próxima à 0,01 eV, a partir da qual α_{th} assume um valor quase constante e independente da energia do nêutron. Assim sendo, deve-se esperar que os valores de η_{th} da célula sejam tanto maiores quanto maior for a razão de moderação da mesma.

Para uma mesma razão de moderação, a magnitude do espectro de nêutrons térmicos é tanto maior quanto menor for a concentração de PuO_2 na vareta combustível, diminuindo a diferença com o aumento da energia em questão. Entretanto, as taxas de reação de fissão e de captura dos isótopos Pu-239 e Pu-241 são superiores às mesmas reações do isótopo U-235, o que deve resultar num acréscimo de $\Sigma_{a, th}$ e $\nu\Sigma_{f, th}$ quando se aumenta a concentração de PuO_2 na célula, o mesmo acontecendo para os parâmetros celulares integrados na região de energias térmicas.

Comparando as Figuras 4.4.1 e 4.4.2 observa-se que, para uma mesma concentração de PuO_2 na vareta, a magnitude do espectro térmico é tanto maior quanto maior for a quantidade de Pu-240. Observa-se uma tendência contrária após o grupo 29, correspondendo à energia de 0,625 eV quando se utiliza uma estrutura de 30 grupos térmicos, ou após a energia de 0,503 eV (grupo 21) quando se utiliza uma estrutura de 36 grupos térmicos. A depressão no espectro em torno da energia de 1.05 eV é mais

significativa quanto maior for a quantidade de Pu-240 na vareta combustível. Desta forma, um aumento na quantidade de Pu-240 no PuO_2 deve provocar um aumento no valor de D_{th} quando se utiliza um "cut-off" térmico de 0,625 eV. Entretanto, quando se utiliza um "cut-off" térmico superior, a situação pode ser invertida.

Esta autoblindagem no espectro térmico devido à ressonância do isótopo Pu-240, combinada com a redução da quantidade de Pu-239, causa uma redução no valor das constantes celulares térmicas e dos parâmetros térmicos integrais, conforme se aumenta a concentração de Pu-240 no PuO_2 .

As Figuras 4.4.5 e 4.4.6 mostram o comportamento das secções de choque de fissão e captura na faixa de energia de 10^{-2} a 3 eV para os principais nuclídeos constituintes das varetas combustíveis. Pode-se verificar a importância dos nuclídeos Pu-239, Pu-241 e U-235 sobre os demais para estas duas reacções na região de energias dos nêutrons térmicos.

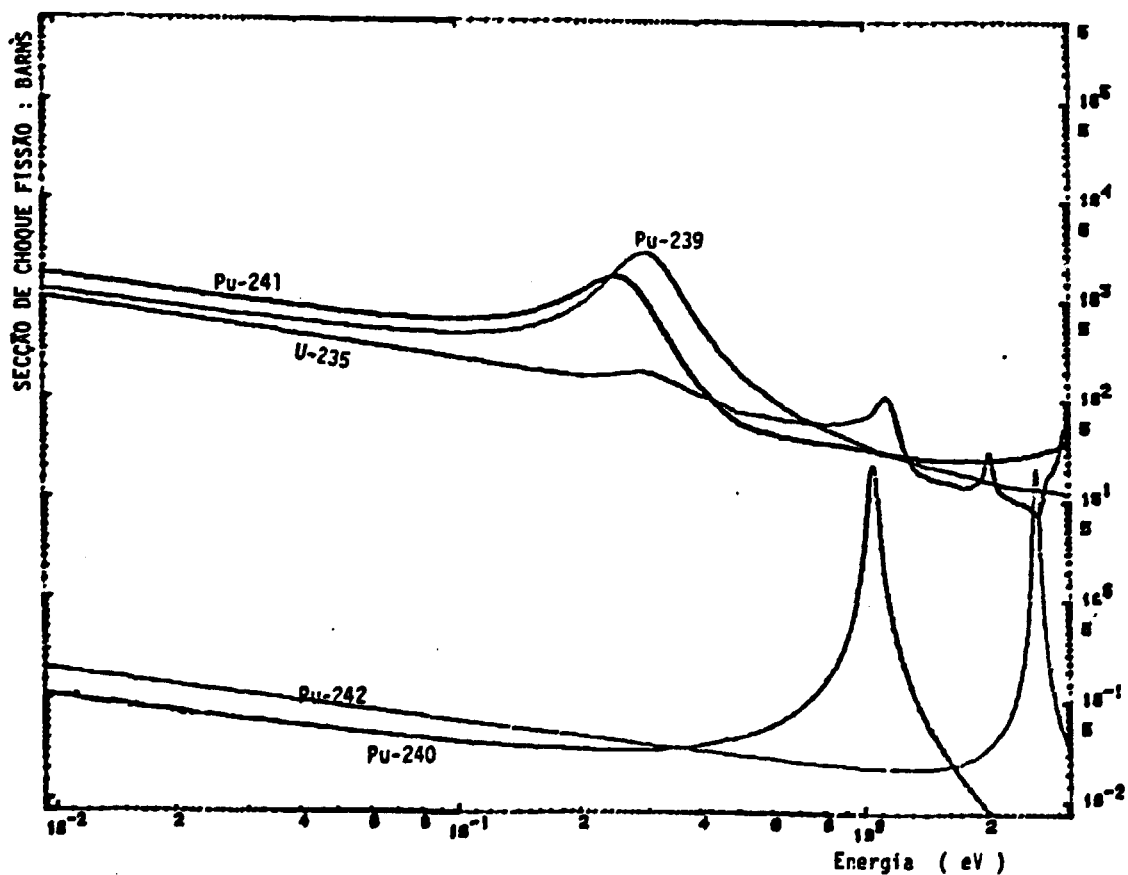


Figura 4.4.5 - Secção de choque de fissão X energia

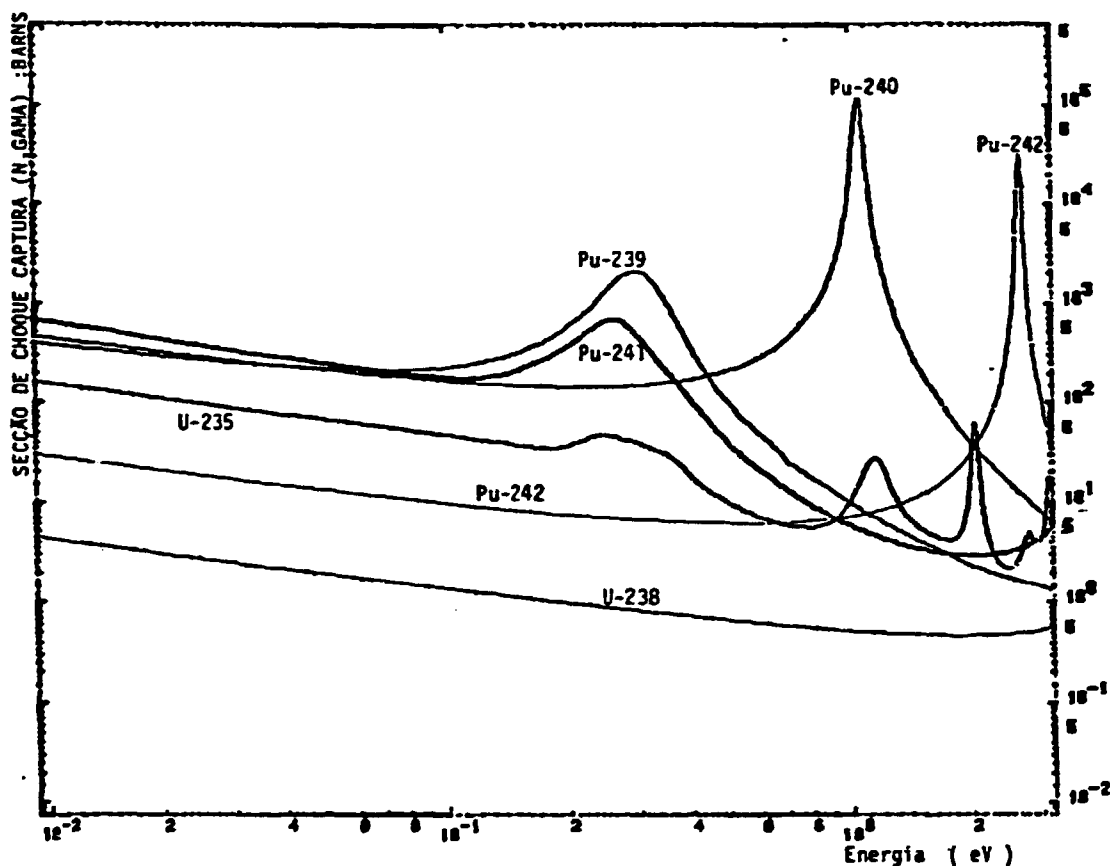


Figura 4.4.6 - Secção de choque de captura (n,gama) X energia

Na Figura 4.4.6, ressalta-se a importância da forte ressonância próxima à energia de 1,05 eV do Pu-240, a qual é mais significativa para a reação de captura (n,gama). Também pode-se verificar o comportamento suave da secção de choque de captura (n,gama) do nuclídeo U-238 na faixa de energia de 0,01 a 3 eV.

A razão entre a taxa de captura térmica e a taxa de fissão térmica (α_{th}) para os núclídeos Pu-239, Pu-241 e U-235 é colocada em função da energia do nêutron e mostrada na figura 4.4.7.

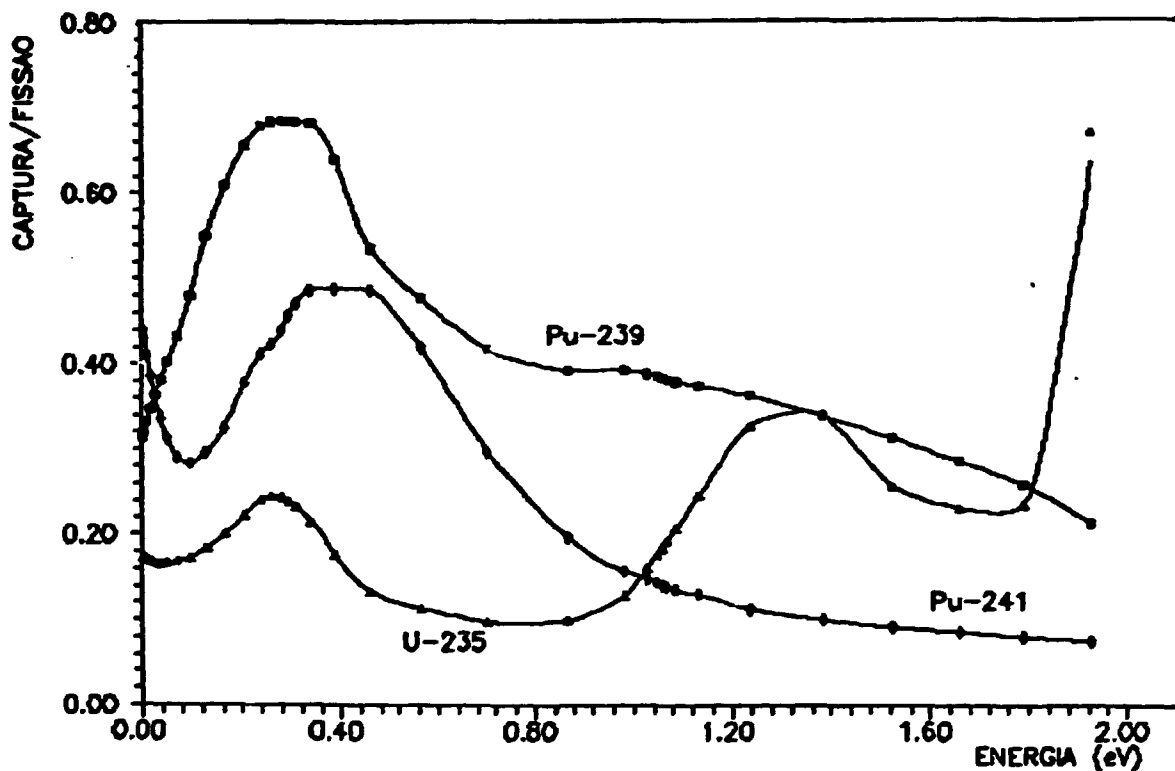


Figura 4.4.7 - Razão entre Captura e Fissão X energia

No quadro abaixo pode-se resumir, de uma forma geral, o comportamento das constantes celulares conforme se aumenta a razão de moderação, a concentração de PuO_2 e a quantidade de Pu-240 .

CONSTANTE CELULAR	$\uparrow (v_{\text{H}}/v_{\text{F}})$	$\uparrow \text{PuO}_2$	$\uparrow \text{Pu-240}$
R-28	↓	↑	↓
D-28	↓	↑	↓
D-25	↓	↑	↓
CON	↓	↑	↓
$\Sigma_{\text{a th}}$	↓	↑	↓
$\nu \Sigma_{\text{f th}}$	↓	↑	↓
η_{th}	↑	↑	↓
f	↓	↑	↓
P	↑	↓ ou ↑	↓
D_{th}	↓	↓ ou ↑	↑ ou ↓

CAPITULO 5 : RESULTADOS OBTIDOS

O desempenho do sistema HAMMER-TECHNION no estudo de células de UO_2 - PuO_2 foi analisado, neste capítulo, avaliando os principais parâmetros celulares integrais e constantes de grupo, definidos no capítulo 3, calculados segundo as seguintes situações :

- 1) energias de corte térmicas de 0,625 eV e 1,855 eV ;
- 2) métodos de cálculo do espectro térmico de Carlvik e "standard Thermos" ;
- 3) células com combustível de :
 - a) UO_2 -2% PuO_2 , com três diferentes concentrações de Pu-240 (8%, 16% e 24% de Pu-240 no PuO_2), e razão de moderação variando de 1,211 a 5,635 ;
 - b) UO_2 -4% PuO_2 (18%Pu-240) e razão de moderação variando de 1,500 a 9,000 ;
 - c) UO_2 -6,6% PuO_2 (8,57%Pu-240) e razão de moderação variando de 1,680 a 10,730.

Na seção 5.1 apresenta-se os valores de k_{eff} calculados com o código HRG3, e extraídos da referência / 88 /, confrontando os resultados obtidos com as bibliotecas de dados nucleares ENDF/B-II e BNWML, utilizadas naquela referência, com a biblioteca disponível no IPEN/CNEN-SP .

Na seção 5.4, o tempo de computação utilizado no processamento do sistema HAMMER-TECHNION com sua estrutura de grupos de energia térmica original é comparado com o tempo necessário quando se utiliza a nova estrutura de grupos implementada neste trabalho.

As seções de choque homogeneizadas e colapsadas em quatro grupos de energia,

calculadas com o sistema HAMMER-TECHNION nas situações acima descritas, foram utilizadas para execução do código CITATION, considerando duas regiões para o reator, um núcleo homogêneo e um refletor de água; a altura física da região combustível equivale à parte ativa da vareta combustível. O raio crítico R_c é calculado pelo número de varetas crítico N_c , que é um dado experimental fornecido na referência / 87 /. Os valores de k_{ef} calculados com o código CITATION são apresentados na seção 5.5 .

Cumpra aqui afirmar que, em termos de comparação entre os resultados calculados e os medidos experimentalmente, a análise de k_{ef} calculado com o código CITATION exprime o principal resultado deste trabalho, já que o parâmetro experimental N_c utilizado neste código, é de boa confiabilidade, e para os cálculos realizados neste trabalho (geometria R-Z) o código CITATION independe do valor do "buckling" crítico, parâmetro este, necessário nos cálculos com o sistema HAMMER-TECHNION e, como já dito anteriormente, não foi determinado com razoável precisão nos experimentos estudados.

Os valores de k_{ef} e k_{inf} obtidos com o programa LASER, que também possui um "cut-off" térmico em 1,855 eV , com os modelos de espalhamento disponíveis neste programa : modelo de Nelkin e de gás livre, são apresentados na seção 5.6 .

Os valores calculados quando se procede o tratamento das ressonâncias resolvidas com o módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II serão apresentados no próximo capítulo.

5.1 – Fator de Multiplicação de nêutrons . –

Os resultados obtidos para o fator de multiplicação de nêutrons na célula, definido nas seções 3.3.1 e 3.3.2, por ser a grandeza de maior interesse em experimentos críticos, e conseqüentemente ser a mais avaliada nas referências pesquisadas, iniciam este capítulo. Primeiramente serão apresentados os valores do fator de multiplicação efetivo (k_{ef}) e em seguida os valores do fator de multiplicação infinito (k_{inf}).

Fator de Multiplicação Efetivo : (k_{ef}) . –

A análise deste parâmetro é bastante complexa pois são muitas as variáveis que influenciam na determinação de seu valor. Como pôde ser visto na seção 3.3.1 deste trabalho, o valor de k_{ef} depende fortemente da fuga de nêutrons do sistema, e é esta grandeza que parece afetar mais pronunciadamente o valor de k_{ef} . Entretanto, muitas são as possíveis fontes de erro que podem gerar incertezas nestas análises, e assim sendo, uma perfeita compreensão destas incertezas poderia estimar um valor bastante preciso do fator de multiplicação efetivo de nêutrons na célula.

Dentre as fontes de erro mais relevantes em nossa análise, podemos destacar a representação do combustível e o arranjo da rede de células unitárias.

Quando se assume que o combustível é uma solução sólida de UO_2 - PuO_2 , o fato de partículas de PuO_2 de diâmetro médio 25 μm estarem presentes nas varetas combustíveis está sendo desconsiderado. Isto já acarreta erro na medida da reatividade do sistema. No trabalho de Liikala / 48 /, pode-se verificar que a menor variação da reatividade devido à blindagem dentro das partículas de PuO_2 ocorre para as células mais estreitas. Também se espera que, à medida que se aumenta a concentração de Pu-240 na vareta, o efeito líquido da reatividade se torne mais positivo. A magnitude desta variação atinge uma faixa de 0,1

a 0,7% $\Delta k/k$ para as células de $UO_2-1.5\%PuO_2$, analisadas na referência acima citada.

Todavia, o efeito da blindagem das partículas de PuO_2 , não foi considerado neste trabalho.

As variações nas densidades do combustível, altura da vareta, espessura do revestimento e espaçamento entre células, também consistem em uma fonte de erro de difícil análise neste trabalho, uma vez que estas são características das tolerancias de fabricação e modelagem do sistema, das quais não se teve informações precisas.

Também não é muito confiável o valor do "buckling" utilizado neste trabalho, pois este parâmetro não foi muito bem determinado no experimento / 87 /. Comparando os valores do "buckling" fornecidos naquele experimento com os fornecidos por Liikala / 48 /, nota-se uma diferença em torno de 6% para as células mais estreitas, como a do caso A1 descrita na seção 3.1, e para as células mais espaçadas, caso A6, esta diferença é menor, cerca de 1% apenas.

As Tabelas 5.1.1, 5.1.2 e 5.1.3 apresentam os valores de k_{ef} para as células de UO_2-PuO_2 , calculados com o sistema HAMMER-TECHNION, e conseqüentemente sujeitos às possíveis fontes de erro especificadas acima. A dependência de k_{ef} com a fuga de nêutrons da célula pode ser notada nestas tabelas. Verifica-se uma tendência do sistema HAMMER-TECHNION em subestimar o valor de k_{ef} para as células mais estreitas. Isto, embora dependendo da qualidade do "buckling", demonstra a consistência da expressão utilizada por este sistema para o cálculo do fator de multiplicação efetivo de nêutrons, dada na seção 3.3.1.

A maior discrepância entre o valor medido ($k_{ef} = 1,0000$) e o valor calculado com o sistema HAMMER-TECHNION, ocorre para as células de "pitch" de 1,050 polegadas com 2% PuO_2 , o que corresponde ao segundo maior valor de "buckling" para estas mesmas células. Tudo indica que deva haver um efeito combinado entre a razão de moderação (VM/VF) e o valor de "buckling" usado para os cálculos, resultando num maior desvio do

valor experimental. Na Tabela 5.1.1 nota-se que esta discrepância, dimensionada em 1,73% ($\Delta k/k$) para as células identificadas como os casos C, chega a 4,07% para os casos B.

Tabela 5.1.1
Valores de k_{ef} via H-TEC - células de $UO_2-2\%PuO_2$

CASO	Energia de corte térmica (Cut-off)			
	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	0,9851292	0,9830365	0,9827479	0,9884962
A2	1,0216490	1,0209280	1,0190060	1,0225820
A3	1,0320900	1,0317820	1,0300260	1,0321960
A4	1,0266700	1,0264720	1,0249890	1,0264680
A5	1,0218970	1,0214650	1,0207630	1,0211610
A6	1,0105340	1,0100000	1,0095490	1,0096690
	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	1,0367590	1,0349910	1,0339860	1,0388970
B2	1,0418990	1,0407970	1,0399040	1,0428530
B3	1,0341910	1,0333180	1,0326660	1,0346450
B4	1,0247420	1,0238060	1,0238770	1,0244540
B5	1,0112270	1,0102420	1,0105300	1,0107810
	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	1,0031020	0,9985346	0,9998351	1,0120930
C2	1,0118560	1,0095890	1,0089560	1,0165200
C3	1,0188590	1,0173350	1,0169080	1,0216250
C4	1,0150570	1,0137840	1,0136440	1,0169320
C5	1,0017940	1,0005550	1,0011100	1,0024970
C6	0,9979148	0,9965797	0,9974120	0,9982945

Todavia, ressalta-se que existem suspeitas sobre a qualidade dos dados de entrada das células que contém 2%PuO₂(16%Pu240), uma vez que a tendência do efeito da concentração de Pu240 é suavizar a discrepância acima.

Confrontando os resultados obtidos quando se utiliza o método de Carlvik para o cálculo do espectro de nêutrons térmicos com o procedimento padrão do sistema

HAMMER-TECHNION, verifica-se que os valores obtidos com este último, em geral parecem subestimados em relação ao primeiro, quando se utiliza a versão original do código que possui energia de corte térmica de 0,625 eV. Entretanto, nota-se uma situação inversa quando se utiliza um "cut-off" térmico em 1,855 eV.

Como se pode verificar no apêndice A, o método de Carlvik faz um melhor tratamento para a fuga de nêutrons térmicos do sistema, superestimando o valor do k_{ef} em relação ao procedimento padrão do Thermos, para as células mais apertadas.

A diferença entre os valores calculados de k_{ef} com ambos os métodos acima citados, quando se utiliza a versão com a estrutura de grupos térmicos original, varia desde 0,32% até 0,05% ($\Delta k/k = (k_1 - k_2)/k_1$, onde k_1 é o valor calculado com o método de Carlvik e k_2 é o valor obtido com o procedimento padrão) das células estreitas para as mais espaçadas respectivamente. Outra observação importante é o fato de que Δk aparentemente depende da concentração de Pu-240 no combustível. Para células estreitas, maior será o valor de Δk quanto maior for a concentração deste isótopo. O oposto se verifica para as células mais moderadas.

Entretanto, quando se utiliza a versão que possui 36 grupos térmicos, o valor de Δk varia desde -1,37% para a célula mais estreita com 24% de Pu240 até +0,03% para a célula mais espaçada com 8% Pu240.

Para um mesmo método de cálculo do espectro de nêutrons térmicos, também é interessante comparar os resultados de k_{ef} calculados com ambas as energias de corte térmicas estudadas. Quando os resultados com o "cut-off" implementado são confrontados com o original, verifica-se que, o método de Carlvik superestima o cálculo de k_{ef} com o "cut-off" original, sendo a diferença ($\Delta k/k = (k_1 - k_2)/k_1$, onde k_1 é o valor calculado com o "cut-off" original, e k_2 é o valor calculado com o "cut-off" implementado) dependente da razão de moderação da célula e da concentração de Pu240 na vareta combustível. Nos dados apresentados na Tabela 5.1.1, nota-se que esta diferença diminui

para as células mais térmicas e será tanto menor quanto menor for a concentração de Pu240 na vareta combustível. O maior valor de Δk é cerca de 0,45% verificado na célula mais estreita ("pitch"=0,80 polegadas) que possui 24% de Pu240.

Confrontando agora os resultados obtidos de k_{eff} com ambas as energias de corte térmicas estudadas, utilizando o procedimento padrão do sistema HAMMER-TECHNION para cálculo do espectro térmico, verifica-se que, com o "cut-off" térmico maior, os valores de k_{eff} são maiores do que com o "cut-off" original. Aqui também, esta diferença depende do "pitch" e da concentração de Pu240 no combustível, sendo o maior valor de Δk novamente verificado para a célula mais estreita de $UO_2-2\%PuO_2(24\%Pu240)$, cerca de -1,22%, e o menor valor de Δk , cerca de -0,012%, verificado para a célula mais aberta de $UO_2-2\%PuO_2(8\%Pu240)$.

Para as células que contém $UO_2-4\%PuO_2(18\%Pu240)$, as quais correspondem à maior concentração do isótopo Pu-240 de todos os casos aqui estudados, a análise dos resultados obtidos para o k_{eff} , apresentados na Tabela 5.1.2, para uma respectiva energia de corte térmica também é sensível ao método de cálculo do espectro térmico. Entretanto, nota-se que Δk , em princípio, diminui com o alargamento da célula, voltando a aumentar após um valor respectivo de "pitch", o que corresponde à célula de razão de moderação igual a 7,859. Este efeito é verificado para ambas as versões que utilizam os diferentes "cut-off" estudados. Todavia, quando se utiliza o método padrão do Thermos e se compara os resultados de k_{eff} obtidos com os dois "cut-off" utilizados, verifica-se que a diferença Δk diminui constantemente com o aumento da razão de moderação, sendo o maior valor de Δk verificado para a célula mais estreita ($\Delta k = -1,37\%$), e o menor valor ($\Delta k = -0,00359\%$) verificado para a célula mais aberta. O sinal negativo de Δk significa que os valores obtidos com a versão que utiliza o "cut-off" de 0,625 eV são menores que os valores obtidos com a versão que utiliza o "cut-off" de 1,855 eV.

Conforme pode-se observar na Tabela 5.1.3, a análise das células de $UO_2-6,6\%PuO_2$ (8,57% de Pu240), também demonstra um comportamento semelhante ao das células com 4%PuO₂ discutido no último parágrafo.

Tabela 5.1.2
Valores de k_{ef} via H-TEC - Células de $UO_2-4\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO		
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	1,0180838	1,0075810	1,0083030	1,0221780
D2	1,0144420	1,0125160	1,0114880	1,0223340
D3	1,0342480	1,0330710	1,0312240	1,0385660
D4	1,0316340	1,0307440	1,0286400	1,0341750
D5	1,0175590	1,0166080	1,0147530	1,0171430
D6	1,0030260	1,0015760	0,9999924	1,0006530
D7	1,0052780	1,0034660	1,0015860	1,0016220

Tabela 5.1.3
Valores de k_{ef} via H-TEC - Células de $UO_2-6,6\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO		
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	0,9967117	0,9909476	0,9975620	1,0120230
E2	1,0131250	1,0092150	1,0128540	1,0259620
E3	1,0153160	1,0150780	1,0120700	1,0191610
E4	1,0205110	1,0205590	1,0168820	1,0226290
E5	1,0232170	1,0234130	1,0191760	1,0216580

A biblioteca térmica utilizada para se obter os resultados apresentados aqui foi produzida com o sistema acoplado NJOY - AMPX-II.

Segundo as observações acima, e visando o valor medido de k_{ef} , pode-se dizer, em caráter qualitativo que, para células muito estreitas que possuem alta concentração de Pu-240, o método de Carlvik aplicado à versão que possui o maior "cut-off" térmico, fornece valores de k_{ef} mais próximos aos experimentais, e para as células mais térmicas que também possuem alta concentração de Pu-240, a versão com o novo "cut-off", utilizando o procedimento padrão do Thermos (sem Carlvik), é mais recomendada. Entretanto, ressalta-se que os resultados apresentados aqui estão sujeitos a uma reanálise de acordo com a qualidade dos dados de entrada utilizados, isto é, dependem da pesquisa destes dados.

Para os casos A1 e A6, os valores de k_{ef} também foram obtidos / 48 / com o código HRG3, utilizando dois diferentes arquivos de dados nucleares básicos, o ENDF/B-II e o BNWML. Os resultados estão ilustrados na Tabela 5.1.4 .

Tabela 5.1.4
Valores de k_{ef} calculados com o HRG3 e H-TEC

CASO	Cálculo com HRG3		Cálculo com H-TEC	
	BNWML	ENDF/B-II	original	novo c-off
A1	1,01060	0,98050	0,98274	0,98849
A6	0,99930	0,99190	1,00954	1,00966

As duas colunas correspondentes aos valores calculados com o sistema HAMMER-TECHNION, identificadas como : cálculo com H-TEC, foram obtidas utilizando o processamento padrão do programa Thermos para o cálculo do espectro térmico e o arquivo de dados nucleares disponível no IPEN/CNEN-SP. O código HRG3, semelhante à versão original do HAMMER-TECHNION, possui estrutura de 30 grupos térmicos, porém com energia de corte em 0,683 eV.

Em princípio, os dados de secções de choque do ENDF/B-II são melhores que os do

BNWML, devido ao primeiro usar dados experimentais e avaliações mais recentes do que o último.

A maioria dos núclídeos constituintes na biblioteca de dados nucleares inicialmente utilizada neste trabalho são originários do arquivo ENDF/B-IV, o qual foi elaborado principalmente para aplicação em reatores rápidos, apresentando a captura nas ressonâncias do núclídeo U-238 superestimada em relação aos dados da sua versão anterior, ENDF/B-II. Isto faz com que o ENDF/B-IV seja pouco utilizado em reatores térmicos. Por essa razão, o U-238 utilizado neste trabalho é o mesmo da biblioteca original do sistema HAMMER.

Para eliminar as incertezas na determinação do fator de multiplicação de nêutrons da célula, devido ao valor de "buckling", estuda-se o fator de multiplicação infinito (k_{inf}) ao invés do k_{ef} . A menos dos parâmetros que determinam o escape de nêutrons da célula, o k_{inf} possui o mesmo comportamento do k_{ef} analisado acima.

Fator de Multiplicação Infinito : (k_{inf}) . -

A expressão matemática utilizada pelo código HAMMER-TECHNION, para determinar o valor de k_{inf} pode ser vista na seção 3.3.2 deste trabalho. Como o valor de k_{inf} normalmente não é medido experimentalmente, não se pode aqui comparar os valores teóricos calculados com os experimentais.

Na Tabela 5.1.5 pode-se verificar o comportamento de k_{inf} com o aumento da concentração de Pu-240 no PuO_2 , bem como a influência da razão de moderação da célula sobre este parâmetro. O efeito do "cut-off" térmico nas células com 2% de PuO_2 também é avaliado nesta tabela.

Tabela 5.1.5
Valores de k_{inf} via H-TEC - células de $UO_2-2\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			TEERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	1,3441570	1,3384890	1,3415180	1,3466000
A2	1,3923360	1,3883310	1,3892050	1,3911390
A3	1,3809520	1,3777520	1,3784910	1,3786850
A4	1,3510700	1,3482780	1,3490590	1,3485530
A5	1,2665110	1,2642320	1,2651990	1,2639870
A6	1,2297730	1,2276060	1,2286440	1,2273040
	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	1,3512840	1,3462000	1,3480200	1,3517880
B2	1,3392810	1,3353180	1,3369360	1,3382990
B3	1,3092490	1,3058720	1,3074680	1,3077960
B4	1,2251070	1,2224840	1,2241320	1,2233700
B5	1,1887400	1,1862940	1,1879640	1,1870090
	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	1,24729800	1,2392490	1,2435570	1,2567000
C2	1,2936320	1,2879840	1,2902040	1,2973600
C3	1,2826400	1,2782610	1,2803530	1,2840080
C4	1,2537840	1,2500840	1,2521480	1,2542180
C5	1,1724280	1,1696090	1,1716670	1,1719920
C6	1,1372760	1,1346860	1,1367280	1,1367170

As Tabelas 5.1.6 e 5.1.7 apresentam os valores de k_{inf} calculados para as células com 4% e 6,6% de PuO_2 na vareta combustível. Comparando os resultados apresentados nestas tabelas pode-se analisar o comportamento do k_{inf} conforme se aumenta concentração de PuO_2 na vareta combustível.

Tabela 5.1.6
Valores de k_{inf} via H-TEC - células de $UO_2-4\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	1,361704	1,354119	1,358911	1,374833
D2	1,395537	1,389325	1,392084	1,403839
D3	1,405833	1,400823	1,402194	1,409081
D4	1,390818	1,386399	1,387175	1,391683
D5	1,298462	1,294980	1,295094	1,296019
D6	1,187327	1,184290	1,183771	1,183384
D7	1,132485	1,129593	1,128405	1,127638

Tabela 5.1.7
Valores de k_{inf} via H-TEC - células de $UO_2-6,6\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	1,398173	1,387202	1,400458	1,418366
E2	1,446775	1,437889	1,447603	1,463476
E3	1,527017	1,522311	1,523336	1,530015
E4	1,523208	1,519025	1,518851	1,523486
E6	1,417143	1,414362	1,412080	1,412633

Analisando os valores apresentados nas Tabelas 5.1.5, 5.1.6 e 5.1.7 verifica-se que a diferença percentual entre os valores calculados de k_{inf} com as duas diferentes energias de corte térmicas utilizadas, semelhante ao k_{ef} analisado na seção precedente, é dependente

da razão de moderação da célula e da concentração de PuO_2 na vareta combustível. Definindo esta diferença percentual como $\Delta k = (k_1 - k_2)/k_1 \times 100$, onde k_1 é o valor de k_{inf} calculado com a energia de corte térmica em 0,625 eV e k_2 é o valor de k_{inf} calculado com a energia de corte térmica em 1,855 eV, verifica-se o maior valor de Δk , cerca de 0,784% quando se utiliza o método de Carlik para cálculo do espectro de nêutrons térmicos, para a célula mais apertada que contém a maior concentração de PuO_2 dentre os casos estudados (células de UO_2 -6,6% PuO_2). Esta diferença percentual se mostra inferior quando se utiliza o método padrão do Thermos, resultando um valor até mesmo negativo (-1,278% para a mesma célula citada acima) para as células mais apertadas.

Quando se compara os dois métodos de cálculo utilizados no Thermos, verifica-se que o método de Carvik possui uma tendência de superestimar o valor de k_{inf} em relação aos valores obtidos com o método padrão do Thermos, sendo este efeito mais acentuado para as células mais térmicas. Neste ponto é interessante citar o fato de que, quando se utiliza a versão que possui estrutura padrão de grupos térmicos, esta tendência aparece fortemente dependente da concentração de PuO_2 da célula, enquanto que para as células que possuem 2% PuO_2 , esta influência tende a diminuir com o aumento da razão de moderação (VM/VF) da célula. Para as células que possuem mais plutônio, como as com 4% e 6,6% de PuO_2 , o efeito é oposto, isto é, quanto maior a razão de moderação, mais superestimado é o valor de k_{inf} calculado com o método de Carvik em relação ao valor calculado com o procedimento padrão do Thermos.

Valores obtidos / 48 / para K_{inf} com o código HRG3, considerando o arquivo de dados nucleares ENDB/B-II, em média são cerca de 2,5% menores que os valores obtidos neste trabalho para as células mais estreitas, e cerca de 1,4% para as células mais espaçadas, cabendo a menor diferença percentual aos valores obtidos com a versão que utiliza o novo "cut-off" térmico.

Uma melhor compreensão do comportamento do fator de multiplicação de nêutrons, efetivo ou infinito, requer uma análise mais detalhada das componentes envolvidas em seu cálculo. Isto é o propósito da próxima seção.

5.2 – Parâmetros Celulares Integrais .—

Os valores calculados dos parâmetros integrais homogeneizados para as células unitárias estudadas neste trabalho, os quais foram definidos na seção 3.3, são agora tabelados, e será analisada a influência destes no cálculo de experimentos críticos.

Acredita-se que, para sistemas que contém plutônio no combustível, além da fuga de nêutrons, as taxas de reação térmica ($\bar{\eta}f$) sejam os componentes mais importantes de k_{eff} , uma vez que, segundo Liikala / 48 /, a probabilidade de escape à ressonância (p) e o fator de fissão rápida (ϵ) tendem à unidade para sistemas com elevada razão de moderação (sistemas considerados térmicos). Por essa razão, inicialmente serão analisados os resultados obtidos neste trabalho para o η , e em seguida o fator de utilização térmica (f). A análise conjunta destes dois parâmetros ilustra o comportamento das taxas de reação térmica da célula unitária homogeneizada em função das alterações na região de energias térmicas, realizadas no sistema HAMMER-TECHNION.

Número médio de nêutrons produzidos por fissão por
nêutron térmico absorvido no combustível (η) .—

Da própria definição de η podemos ver que somente os nuclídeos físseis constantes na

vareta combustível (U-235, Pu-239, Pu241 e Am-241 nos casos aqui estudados) influenciam na determinação deste parâmetro. Na seção 3.3.3 verificou-se que o nuclídeo Pu-241 é que possui o maior valor de η , sendo este crescente conforme se aumenta a concentração de PuO₂, porém isto é compensado devido ao fato deste nuclídeo contribuir com a menor fração de absorção, conforme pode ser verificado na seção 3.3.4. Assim, embora os valores de η sofram influência do nuclídeo Pu-241, as taxas de reação térmica $\bar{\eta}f$ são mais influenciadas pelos nuclídeos Pu-239 e U-235 respectivamente. Isto pode ser confirmado segundo as observações feitas no capítulo precedente.

Uotinen / 85 / estudou o efeito do decaimento do plutônio 241 nas análises de experimentos críticos de plutônio. Em seu trabalho pode-se verificar que, embora a seção de choque de captura do Pu-241 e Am-241 sejam da mesma ordem de magnitude, a seção de choque de fissão do primeiro é cerca de 300 vezes maior que a do segundo. Assim a variação na taxa de absorção térmica da célula ($\bar{\eta}f$) devido a este decaimento é mais influenciada pela variação de $\bar{\eta}$ do que de f . Assim sendo, é de grande importância conhecer com bastante precisão a quantidade de Am-241, em experimentos que contém quantidades significativas de Pu-241, para se eliminar as incertezas nas correções que são calculadas para o efeito estudado.

Nas Tabelas 5.2.1, 5.2.2 e 5.2.3, pode-se analisar o comportamento de η quando se utiliza o método de Carlvik no Thermos. Os valores de η , calculados utilizando o método de Carlvik para cálculo do espectro térmico, são menores que os obtidos usando o procedimento padrão do Thermos. A diferença vai desde 0,860%, encontrada para a célula mais apertada que contém 6,6% PuO₂, até 0,0034% para a célula mais espaçada que contém 2%PuO₂(24%Pu240). Isto aparentemente demonstra que ambas as opções de cálculo do Thermos fornecem resultados tanto mais divergentes quanto maior a concentração de PuO₂ na vareta combustível, e quanto mais apertada for a célula. Quando se utiliza uma energia de corte térmica maior, os resultados são ainda mais divergentes.

Tabela 5.2.1
Valores de η via H-TEC - Células de UO_2 -2% PuO_2

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	1,78182	1,67905	1,78597	1,70027
A2	1,79528	1,72393	1,79764	1,73581
A3	1,80272	1,74752	1,80406	1,75487
A4	1,80665	1,75974	1,80760	1,76517
A5	1,81162	1,77496	1,81210	1,77816
A6	1,81293	1,77393	1,81329	1,78158
	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	1,76451	1,67508	1,76615	1,69074
B2	1,77071	1,70116	1,77161	1,71123
B3	1,77395	1,71466	1,77458	1,72224
B4	1,77801	1,73146	1,77831	1,73616
B5	1,77908	1,73584	1,77929	1,73984
	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	1,70260	1,54905	1,70396	1,58404
C2	1,71203	1,60362	1,71283	1,62463
C3	1,71694	1,63227	1,71735	1,64633
C4	1,71946	1,64710	1,71974	1,65800
C5	1,72259	1,66556	1,72269	1,67277
C6	1,72340	1,67037	1,72346	1,67669

Pode-se verificar, na Tabela 5.2.1, que quanto maior a quantidade de Pu-240 na vareta combustível, menor o valor de $\bar{\eta}$.

Comparando agora os resultados de η calculados com as duas versões do HAMMER-TECHNION, nota-se que os valores deste parâmetro, calculados com a versão que utiliza "cut-off" térmico em 0,625 eV são maiores que os calculados com a versão que

utiliza "cut-off" térmico em 1,855 eV. A diferença entre estes valores tende a se reduzir conforme o arranjo celular se torna mais térmico. A diferença é um pouco mais acentuada para cálculos com o método de Carlvik do que com o procedimento padrão do Thermos. A maior diferença, para os casos com 2%PuO₂ mostrados na Tabela 5.2.1, ocorre para a célula mais apertada que possui maior quantidade de Pu-240, e a menor para a célula mais espaçada contendo menor quantidade deste nuclídeo. Desta forma, a diferença parece ser proporcional à concentração de Pu-240.

Cumpra aqui lembrar que, aumentando o intervalo de energia térmica, inclui-se as fortes ressonâncias dos isótopos do plutônio. A ressonância gigante do Pu-240 influencia fortemente no cálculo da secção de choque de absorção térmica (Σ_a th) e, conforme verificado no capítulo anterior, nas ressonâncias dos isótopos Pu-239 e Pu-241 a razão entre a secção de choque de captura e a secção de choque de fissão ($\sigma_c/\sigma_f = \alpha$), destes nuclídeos, aumenta. Estes dois fatos levam simultaneamente a uma diminuição no valor de $\bar{\eta}$ quando se utiliza um "cut-off" maior.

Valores de $\bar{\eta}$ para as células com 4% PuO₂ e 6,6% PuO₂ são apresentados nas Tabelas 5.2.2 e 5.2.3. respectivamente.

Tabela 5.2.2.
Valores de $\bar{\eta}$ via H-TEC - Células de UO₂-4%PuO₂

CASO	Energia de corte térmica (Cut-off)			
	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	1,78265	1,63157	1,78744	1,67214
D2	1,79236	1,66922	1,79578	1,69955
D3	1,80229	1,70684	1,80437	1,72729
D4	1,80758	1,72662	1,80911	1,74262
D5	1,81608	1,75803	1,81674	1,76736
D6	1,82023	1,77317	1,82048	1,77979
D7	1,82158	1,77810	1,82169	1,78384

Tabela 5.2.3.
Valores de $\bar{\eta}$ via H-TEC - Células de $UO_2-6,6\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIX			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	1,83127	1,65565	1,84703	1,71729
E2	1,84372	1,69547	1,85726	1,74590
E3	1,87840	1,79395	1,88473	1,81658
E4	1,88536	1,81225	1,89031	1,83018
E5	1,90306	1,85733	1,90516	1,86551

De uma maneira geral o valor de $\bar{\eta}$ aumenta muito suavemente com o aumento da razão de moderação. Também depende fortemente da concentração de PuO_2 ; quanto maior a porcentagem de PuO_2 na vareta, maior o valor de $\bar{\eta}$.

O comportamento de $\bar{\eta}$ descrito acima confirma as implicações dos isótopos do plutônio discutidas no capítulo 4. Conforme se pôde verificar nas seções 3.3.3 e 3.3.4, o nuclídeo que possui a maior fração de absorção na região do combustível, para as células estudadas, é o Pu-239. Analisando a razão entre a secção de choque de captura e a secção de choque de fissão ($\sigma_c/\sigma_f = \alpha$) deste nuclídeo em função da energia do nêutron, pode-se dizer que, embora o número de nêutrons térmicos absorvidos no combustível aumente conforme se aumenta a moderação da célula, isto leva à um acréscimo na fissão. Todavia, quanto mais térmicos forem os nêutrons, a razão α tende a diminuir e conseqüentemente o valor de $\bar{\eta}$ aumenta. Isto também explica o fato deste parâmetro aumentar com a concentração de PuO_2 , isto é, quanto mais PuO_2 maior o efeito da razão α do Pu-239 na célula. O fato de $\bar{\eta}$ diminuir com a quantidade de Pu-240 na vareta, ocorre por dois

motivos distintos, um é devido à diminuição de Pu-239 conforme se aumenta a concentração de Pu-240, e outro por este último ser grande absorvedor de nêutrons nas energias próximas as térmicas, o que contribui para uma redução no valor de $\bar{\eta}$. Assim, como já dito no capítulo anterior, o espectro térmico é deslocado para energias mais baixas, o que aumenta a magnitude da curva do parâmetro α e diminui o valor de $\bar{\eta}$.

Outro parâmetro de importante análise para verificação das taxas de reação térmica é o fator de utilização térmica da célula homogeneizada, que será discutido a seguir.

Fator de Utilização Térmica da Célula (f). —

Inversamente ao que se observou na seção precedente para o valor de $\bar{\eta}$, o fator de utilização térmica da célula (f) diminui com a razão de moderação. Isto pode ser esperado pela própria definição deste parâmetro, uma vez que, quanto maior for o volume de moderador, maior será o denominador da expressão 3.3.4.1 que determina o valor de f.

Como foi observado anteriormente, o Pu-239 possui maior fração de absorção térmica na região do combustível do que os demais núclídeos. Assim sendo, quanto maior a concentração de Pu-239, espera-se obter um maior valor de f. Isto é realmente observado quando se compara os resultados apresentados nas Tabelas 5.2.4 a 5.2.6.

Na Tabela 5.2.4 nota-se que quanto maior a quantidade de Pu-240 na vareta combustível, menor é o valor de f. Isto se explica pelo fato de que, ao aumentar a quantidade deste núclídeo, reduz-se a concentração de Pu-239, e novamente observando a Tabela 3.3.4.1, verifica-se que a fração de absorção deste último é em média 6 vezes maior que a do Pu-240 para as células que possuem maior concentração deste núclídeo.

Cálculos com o método de Carlvik superestimam o valor de f em relação ao obtido com o Termos padrão em cerca de 0,46% para a célula mais estreita contendo 2%PuO₂(8%Pu240), e em 0,053% para a célula mais espaçada contendo 2%PuO₂(24%Pu240). Embora esta diferença tenda a diminuir com a concentração de Pu-240, o oposto ocorre com o aumento de PuO₂. O método de Carlvik chega a superestimar o valor de f em até 0,62% para a célula mais estreita que contém 6,6%PuO₂. Esta diferença é ainda maior quanto se utiliza a versão com o novo "cut-off" térmico .

Tabela 5.2.4.
Valores de f via H-TEC - Células de UO₂-2%PuO₂

	Energia de corte térmica (Cut-off)			
	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	0,93940	0,94067	0,93501	0,93548
A2	0,89513	0,89697	0,89169	0,89278
A3	0,84928	0,85142	0,84700	0,84845
A4	0,81180	0,81405	0,81008	0,81171
A5	0,73874	0,74103	0,73774	0,73954
A6	0,71163	0,71389	0,71080	0,71264
	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	0,89006	0,89316	0,88682	0,88889
B2	0,84285	0,84630	0,84082	0,84331
B3	0,80448	0,80805	0,80302	0,80573
B4	0,73015	0,73372	0,72942	0,73228
B5	0,70271	0,70621	0,70214	0,70503
	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	0,93341	0,93706	0,92930	0,93150
C2	0,88623	0,89076	0,88318	0,88626
C3	0,83805	0,84299	0,83622	0,83979
C4	0,79904	0,80411	0,79779	0,80160
C5	0,72383	0,72885	0,72329	0,72724
C6	0,69616	0,70108	0,69579	0,69974

Também opostamente ao que se observou para o $\bar{\eta}$, com o aumento da energia de corte térmica haverá um acréscimo no valor de f . Isto é de se esperar devido ao fato de ocorrer maior absorção no combustível quando se inclui na região térmica as ressonâncias dos isótopos do plutônio, conforme se fez neste trabalho. Este valor também aumenta com o aumento da concentração de Pu-240, chegando a 0,575% para a célula mais espaçada que contém 4% PuO₂(18%Pu240). Nota-se ainda que, quanto mais térmica é a célula, maior será este efeito.

Na Tabela 5.2.5 pode-se verificar o comportamento do fator de utilização térmica calculado para as células que contém 4% PuO₂.

Tabela 5.2.5
Valores de f via H-TEC - Células de UO₂-4%PuO₂

	Energia de corte térmica (Cut-off)			
	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	0,94168	0,94437	0,93679	0,93823
D2	0,91889	0,92207	0,91448	0,91635
D3	0,88042	0,88410	0,87685	0,87923
D4	0,84799	0,85190	0,84483	0,84749
D5	0,75762	0,76168	0,75524	0,75826
D6	0,67738	0,68123	0,67513	0,67812
D7	0,64114	0,64483	0,63866	0,64157

Valores de f calculados para as células que possuem maior quantidade de PuO₂ (6,6%PuO₂), são mostrados na Tabela 5.2.6 .

Tabela 5.2.6
Valores de f via H-TEC - Células de $UO_2-8,6\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIX			THERNOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	0,97312	0,97386	0,96703	0,96710
E2	0,96351	0,96457	0,95719	0,95753
E3	0,90870	0,91078	0,90316	0,90440
E4	0,88683	0,88911	0,88168	0,88315
E5	0,78121	0,78388	0,77738	0,77939

Uma vez analisados os fatores que contribuem com uma fração térmica para o fator de multiplicação de nêutrons (k_{inf}), deve-se verificar o comportamento dos parâmetros que mais influenciam nas energias epitérmica e rápida. Esta análise foi feita para a probabilidade de escape à ressonância, cujos resultados são avaliados a seguir.

Probabilidade de Escape à Ressonância (p). -

Como previsto teóricamente, o valor de p deve aumentar conforme a célula se torna mais térmica. Quanto maior for a razão de moderação maior será a probabilidade de um nêutron, vindo de uma energia rápida, escapar da ressonância do U-238 e atingir uma energia térmica. Como p é uma grandeza que depende muito pouco dos efeitos que ocorrem na região de energia térmica, nenhuma diferença significativa é notada quando se compara os dois diferentes métodos de cálculo do espectro de nêutrons térmicos utilizados

nesta análise.

Nas tabelas 5.2.7, 5.2.8 e 5.2.9, verifica-se que, aumentando a faixa de energia térmica, aumenta-se o valor de p . Cálculos realizados com o "cut-off" térmico de 1,855 eV superestimam os valores de p em relação aos cálculos realizados com o "cut-off" de 0,625 eV. A diferença chega a 14,55 % para a célula mais apertada que contém maior concentração de PuO_2 (6,6% PuO_2), e tende a diminuir com a razão de moderação, chegando a 2,05% para a célula mais moderada contendo 2% PuO_2 (8%OPu240).

Quando se utiliza a versão original, verifica-se uma redução de p com o aumento de PuO_2 no combustível. Isto pode ser entendido facilmente, pois com a elevação da concentração de PuO_2 , mais absorvedores ressonantes passam a concorrer com o U-238, tendendo a diminuir a probabilidade de escape às ressonâncias. Isto também pode ser notado quando se analisa a Tabela 5.2.7, onde para quantidades maiores de Pu-240 os valores de p são menores.

Todavia, esta dependência de p com a quantidade de PuO_2 torna-se bem menos expressiva quando se utiliza a nova versão com "cut-off" térmico de 1,855 eV, onde se nota um aumento no valor de p com o aumento de PuO_2 no combustível para casos com pouca quantidade de Pu-240 (casos A da Tabela 5.2.7 comparados com casos E da Tabela 5.2.9), e para casos com maior quantidade de Pu-240, verifica-se uma redução em p com o aumento de PuO_2 (casos C da Tabela 5.2.7 comparados com os casos D da Tabela 5.2.8).

A Tabela 5.2.7 apresenta os valores de p calculados para as células que contém 2% PuO_2 , com 8%, 16% e 24% de Pu-240 no PuO_2 . Nesta tabela pode-se verificar que, apesar da variação de p ser em média cerca de 0,2%, quando se aumenta de 8% para 16% a quantidade de Pu-240 no PuO_2 , este efeito é quase desprezível quando se eleva de 16% para 24% a quantidade de Pu-240.

Tabela 5.2.7
Valores de p via H-TEC - Células de UO₂-2%PuO₂

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	0,6620539	0,7139155	0,6620552	0,7139174
A2	0,7648785	0,8040341	0,7648778	0,8040336
A3	0,8208620	0,8518617	0,8208602	0,8518601
A4	0,8504264	0,8767973	0,8504243	0,8767951
A5	0,8881644	0,9083235	0,8881616	0,9083208
A6	0,8981326	0,9165952	0,8981297	0,9165924
	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	0,7608787	0,8064176	0,7608783	0,8064174
B2	0,8175251	0,8536107	0,8175236	0,8536093
B3	0,8475542	0,8782286	0,8475523	0,8782267
B4	0,8859534	0,9093341	0,8859510	0,9093317
B5	0,8961132	0,9174936	0,8961107	0,9174911
	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	0,6480188	0,7181068	0,6480204	0,7181091
C2	0,7529519	0,8065066	0,7529517	0,8065066
C3	0,8112030	0,8536936	0,8112028	0,8536925
C4	0,8422348	0,8783234	0,8422331	0,8783277
C5	0,8819214	0,9093718	0,8819192	0,9093696
C6	0,8925232	0,9175773	0,8925208	0,9175749

Cabe explicar aqui que, acima da energia de 1,855 eV, a absorção do núcleo Pu-239 é mais representativa do que a do Pu-240. Assim sendo, quando se estende o "cut-off" térmico para esta energia, espera-se que, reduzindo Pu-239 no combustível, aumentando a fração de Pu-240, a probabilidade de escape à ressonância aumente. Por outro lado, quando se varia a porcentagem de PuO₂, as absorções epitérmicas e rápidas do urânio e plutônio podem se tornar competitivas dependendo da quantidade do isótopo Pu-239.

As Tabelas 5.2.8 e 5.2.9 apresentam os valores de p calculados para as células com 4% e 6,6% de PuO_2 respectivamente.

Tabela 5.2.8
Valores de p via H-TEC - Células de UO_2 -4% PuO_2

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK		THERNOS PADRÃO		
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	0,6563356	0,7282563	0,6563343	0,7282555
D2	0,7196315	0,7813508	0,7196289	0,7813482
D3	0,7850653	0,8345057	0,7850617	0,8345020
D4	0,8201440	0,8623161	0,8201399	0,8623119
D5	0,8775410	0,9069103	0,8775362	0,9069053
D6	0,9062431	0,9288109	0,9062379	0,9288056
D7	0,9158247	0,9360652	0,9158194	0,9360598

Tabela 5.2.9
Valores de p via H-TEC - Células de UO_2 -6,6% PuO_2

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK		THERNOS PADRÃO		
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	0,5560832	0,6370227	0,5560827	0,6370235
E2	0,6221560	0,6959634	0,6221547	0,6959628
E3	0,7843080	0,8322961	0,7843042	0,8322922
E4	0,8149007	0,8568955	0,8148966	0,8568913
E5	0,8902188	0,9160722	0,8902142	0,9160674

Os resultados aqui reproduzidos apresentam superestimados cerca de 3% em média em relação aos resultados obtidos com o código HRG3 na referência / 48 /, e como também

foi observado nessa referência, resultados para p são essencialmente proporcionais a variações da secção de choque de absorção da célula homogeneizada, a qual será analisada na próxima seção.

Razão entre a captura epitérmica e captura térmica de nêutrons para o nuclídeo U-238 (R-28) . -

Esta grandeza foi definida na seção 3.3.6, onde também se pode verificar a dependência de R-28 com as seções de choque de fissão e absorção homogeneizadas. Nesta seção será mostrado o comportamento de R-28 com a razão de moderação e concentração de PuO_2 na célula.

A Tabela 5.2.10 mostra os valores de R-28 para as células que possuem menor quantidade de PuO_2 analisadas neste trabalho. Verifica-se que o valor deste parâmetro é inversamente proporcional à quantidade de Pu-240 no PuO_2 . Há uma redução média de cerca de 6% no valor deste parâmetro quando se aumenta de 8% para 16% o conteúdo de Pu-240 no PuO_2 , e cerca de 3,2% quando se varia de 16% para 24% . Este comportamento pode ser explicado analisando as variáveis apresentadas na Tabela 3.3.6.1, onde tanto o fluxo (FL) de nêutrons colapsado nos quatro macrogrupos como as seções de choque de absorção (Σ_a) e de fissão (Σ_f) para o U-238 aumentam quando se compara os casos A1 e C1 (colunas 2 e 3 da tabela). O maior acréscimo se verifica no macrogrupo térmico (I=4) onde FL aumenta cerca de 12,76% e Σ_a cerca de 4%, alterando assim, com maior proporção o denominador da expressão 3.3.6.1 que calcula o valor de R-28.

O efeito verificado acima pode ser fisicamente entendido com a redução do nuclídeo Pu-239 e o aumento de Pu-240, para uma mesma porcentagem de PuO_2 , uma vez que o Pu-239 é o grande concorrente do U-238 nas absorções térmicas. Além disso, conforme

previsto no capítulo 4, variações na concentração dos isótopos do plutônio deformam o espectro de nêutrons térmicos, alterando as taxas de reação utilizadas na determinação de R-28.

Tabela 5.2.10
Valores de R-28 via H-TEC - Células de $UO_2-2\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	3,81715+00	3,47719+00	3,72044+00	3,37188+00
A2	2,19689+00	2,05404+00	2,17089+00	2,02250+00
A3	1,54885+00	1,46492+00	1,53933+00	1,45245+00
A4	1,25825+00	1,19660+00	1,25309+00	1,18963+00
A5	9,29219-01	8,89598-01	9,27280-01	8,86921-01
A6	8,50456-01	8,15588-01	8,49069-01	8,13644-01
	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	2,05079+00	1,92764+00	2,02927+00	1,89586+00
B2	1,44970+00	1,37634+00	1,44180+00	1,36343+00
B3	1,17958+00	1,12523+00	1,17525+00	1,11786+00
B4	8,73664-01	8,38280-01	8,71913-01	8,35257-01
B5	8,00479-01	7,69211-01	7,99182-01	7,66932-01
	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	3,40290+00	3,14886+00	3,33345+00	3,03593+00
C2	1,97132+00	1,86050+00	1,95321+00	1,82560+00
C3	1,39353+00	1,32690+00	1,38692+00	1,31223+00
C4	1,13355+00	1,08397+00	1,12989+00	1,07537+00
C5	8,41015-01	8,08390-01	8,39455-01	8,04642-01
C6	7,69392-01	7,40596-01	7,68208-01	7,37698-01

A Tabela 5.2.11 apresenta os valores de R-28 calculados para as células com 4% de PuO_2 .

Tabela 5.2.11
Valores de R-28 via H-TEC - Células de UO_2 -4% PuO_2

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	4,93261+00	4,47688+00	4,79929+00	4,29541+00
D2	3,54441+00	3,27206+00	3,48260+00	3,17934+00
D3	2,43178+00	2,27983+00	2,40945+00	2,24131+00
D4	1,94443+00	1,83634+00	1,93304+00	1,81461+00
D5	1,27626+00	1,21869+00	1,27450+00	1,21301+00
D6	9,93171-01	9,53590-01	9,93927-01	9,52212-01
D7	9,04128-01	8,69813-01	9,05942-01	8,69904-01

Comparando as Tabelas 5.2.10 e 5.2.11, verifica-se que o valor de R-28 aumenta com o aumento da concentração de PuO_2 no combustível. Isto também pode ser explicado com as observações acima, e pelo fato de se diminuir a autoblindagem quando se retira UO_2 . Isto implica (Tabela 3.3.6.1) numa redução no valor do fluxo (FL) e das secções de choque de absorção (Σ_a) e de fissão (Σ_f) do U-238 com o aumento da concentração de PuO_2 (casos C1, D1 e E1 na tabela).

Para todos os casos estudados, verifica-se uma redução no valor de R-28 conforme se aumenta a razão de moderação da célula. Isto está de acordo com a definição de R-28, uma vez que quanto mais moderado o sistema, menos nêutrons serão absorvidos nos três macrogrupos não térmicos, reduzindo assim o numerador e aumentando o denominador da expressão 3.3.6.1.

A Tabela 5.2.12 apresenta os valores de R-28 calculados para as células com 6,6% de PuO_2 .

Tabela 5.2.12
Valores de R-28 via H-TEC - Células de $UO_2-6.6\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO		
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	1,28285+01	1,06996+01	1,19545+01	9,94705+00
E2	9,29688+00	8,03193+00	8,79137+00	7,55733+00
E3	3,80328+00	3,50967+00	3,73003+00	3,42523+00
E4	3,10296+00	2,89115+00	3,06062+00	2,84004+00
E5	1,70522+00	1,62288+00	1,69974+00	1,61451+00

Comparando agora os dois métodos de cálculo do espectro de nêutrons térmicos, o método de Carlvik superestima os valores de R-28 em comparação aos obtidos com o procedimento normal do Thermos. A diferença tende a diminuir com o espaçamento da célula, sendo um pouco mais acentuada quando se utiliza o novo "cut-off" térmico, variando desde 7,03% para a célula mais apertada contendo 6,6%PuO₂ até -0,2% para a célula mais aberta contendo 4%PuO₂. Isto se deve ao fato do fluxo térmico (FL) calculado com o método Carlvik ser menor que o calculado sem este método, o que diminui o denominador da expressão 3.3.6.1.

Aumentando a energia de corte térmica de 0,625 eV para 1,855 eV, verifica-se uma redução no valor de R-28, que varia desde 16,79% para a célula mais apertada (caso E1) até 3,7% para a célula mais aberta contendo 2%PuO₂(24%Pu240). Isto ocorre devido ao fato de que a secção de choque de absorção ($\Sigma_a^{v^{238}}$) cresce cerca de 9,02% no macrogrupo epitérmico (I=3) e decresce cerca de 10,4% no térmico (I=4). Além disso, o fluxo (FL) decresce cerca de 10,37% no macrogrupo I=3 e aumenta cerca de 17,15% no térmico (isto

para o caso A1), o que resulta numa redução da taxa de absorção epitérmica ($\Sigma_a \phi_{I=2}$) e acréscimo na região de energia térmica ($\Sigma_a \phi_{I=4}$).

Contudo, deve-se ressaltar que, a comparação entre os valores de R-28 obtidos para os dois "cut-off" térmicos distintos é feita apenas para se verificar a sua consistência no aumento da faixa de energia térmica, pois este parâmetro é definido fisicamente à energia de 0.625 eV. Cálculos acima desta energia não serão compatíveis com o sentido físico deste parâmetro.

Razão entre as fissões rápidas e as fissões térmicas do nuclídeo U-235 (D-25) . -

Similarmente ao que ocorre com o comportamento de R-28, nota-se pela Tabela 5.2.13, que os valores de D-25 diminuem com o aumento do conteúdo de Pu-240, sendo esta redução cerca de 6,72% quando se eleva a concentração de Pu-240 no PuO₂ de 8% para 16% e cerca de 4,2% quando se eleva de 16% para 24% . Na Tabela 3.3.7.1 pode-se verificar que a secção de choque de fissão do macrogrupo térmico (I=4) do U-235 aumenta cerca de 4,58%, quando se compara os casos A1 e C1, enquanto que a dos três macrogrupos não térmicos aumenta em média cerca de 0,3%, o que resulta numa redução no valor de D-25. Este efeito é decorrente do fato de que o espectro térmico se torna mais "mole" devido a retirada de Pu-239. Entretanto, elevando agora o conteúdo de PuO₂ na vareta, as fissões térmicas do Pu-239 passam a competir com as fissões do U-235, reduzindo o denominador da expressão 3.3.7.1 que fornece o valor deste parâmetro.

A Tabela 5.2.13 apresenta os valores de D-25 calculados para as células que contém UO₂-2% PuO₂, para as concentrações de Pu-240 no PuO₂ iguais a 8%, 16% e 24% .

Tabela 5.2.13
Valores de D-25 via H-TEC - Células de UO_2 -2% PuO_2

Energia de corte térmica (Cut-off)				
CASO	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
Varetas com 8% de Pu-240				
A1	2,48034-01	1,99431-01	2,41474-01	1,92256-01
A2	1,39012-01	1,11863-01	1,37299-01	1,09884-01
A3	9,70420-02	7,80557-02	9,64309-02	7,73079-02
A4	7,85414-02	6,31614-02	7,82138-02	6,27523-02
A5	5,78607-02	4,65289-02	5,77457-02	4,63800-02
A6	5,29413-02	4,25843-02	5,28638-02	4,24807-02
Varetas com 16% de Pu-240				
B1	1,29659-01	1,04826-01	1,28241-01	1,02864-01
B2	9,08020-02	7,32725-02	9,02960-02	7,25097-02
B3	7,36312-02	5,93610-02	7,33573-02	5,89347-02
B4	5,44225-02	4,38366-02	5,43189-02	4,36702-02
B5	4,98541-02	4,01591-02	4,97816-02	4,00379-02
Varetas com 24% de Pu-240				
C1	2,19767-01	1,79480-01	2,15083-01	1,72091-01
C2	1,24199-01	1,00927-01	1,23009-01	9,88098-02
C3	8,70505-02	7,05052-02	8,66284-02	6,96527-02
C4	7,06049-02	5,70903-02	7,03743-02	5,66011-02
C5	5,23007-02	4,22176-02	5,22092-02	4,20132-02
C6	4,78525-02	3,86175-02	4,77869-02	3,84637-02

Observa-se também que, quando se tem 6,6% de PuO_2 (8,57% $Pu240$) nas varetas combustíveis, resultados apresentados na Tabela 5.2.15, os valores de D-25 para o caso E4 (razão de moderação $VM/VF=5,66$), são cerca de 53% maiores que os valores apresentados na Tabela 5.2.14 para o caso D5 ($VM/VF=5,647$), com 4% de PuO_2 e que concentram maior quantidade de $Pu-240$ (18% $Pu240$). Logo espera-se que a maior quantidade de plutônio na vareta combustível diminua a importância das fissões térmicas do nuclídeo

U-235 frente às suas fissões epitérmicas, o que provoca um aumento no valor de D-25.

Tabela 5.2.14
Valores de D-25 via H-TEC - Células de $UO_2-4\%PuO_2$

	Energia de corte térmica (Cut-off)			
	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	3,10958-01	2,51252-01	3,01934-01	2,39198-01
D2	2,20466-01	1,78633-01	2,16371-01	1,72778-01
D3	1,49827-01	1,21263-01	1,48376-01	1,18952-01
D4	1,19382-01	9,65661-02	1,18649-01	9,52915-02
D5	7,81776-02	6,32135-02	7,80803-02	6,29025-02
D6	6,08920-02	4,92855-02	6,09637-02	4,92264-02
D7	5,54787-02	4,49370-02	5,56187-02	4,49601-02

Tabela 5.2.15
Valores de D-25 via H-TEC - Células de $UO_2-6.6\%PuO_2$

	Energia de corte térmica (Cut-off)			
	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	7,56952-01	5,96856-01	6,99846-01	5,41523-01
E2	5,34263-01	4,24604-01	5,02304-01	3,92814-01
E3	2,07239-01	1,66526-01	2,02906-01	1,61801-01
E4	1,68438-01	1,35507-01	1,65946-01	1,32703-01
E5	9,17672-02	7,40250-02	9,14548-02	7,35928-02

O comportamento de D-25 com a razão de moderação da célula também é previsto

pela expressão 3.3.7.1, uma vez que quanto maior esta razão mais nêutrons são termalizados, aumentando a taxa de fissão térmica ($\Sigma_f \phi_{1=4}$) e diminuindo as não térmicas.

Pela mesma razão verificada para os cálculos de R-28, o método de Carlvik também superestima o valor de D-25 em relação aos valores obtidos sem este método, sendo esta superestimativa mais acentuada para as células mais apertadas.

Os valores de D-25 obtidos com o "cut-off" térmico original se apresentam superestimados em média 19% em relação aos obtidos com o novo "cut-off". Novamente, este efeito ocorre devido ao fato do novo "cut-off" estender os cálculos na região de energia térmica, o que provoca um acréscimo da taxa de fissão térmica, aumentando o denominador da expressão que calcula o valor de D-25. Entretanto, assim como para o R-28, o parâmetro D-25 é fisicamente definido à energia de 0,625 eV.

Razão entre a fissão do U-238 e a fissão do U-235 (D-28) . -

A influência da composição isotópica do PuO_2 no cálculo de D-28 é verificada na Tabela 5.2.16, onde se nota uma diminuição no valor deste parâmetro com o aumento da concentração de Pu-240 no PuO_2 . Este efeito é verificado novamente devido ao fato de que a concentração do isótopo físsil Pu-239 diminui com o aumento da quantidade de Pu-240. Assim, quando se retira Pu-239, as fissões térmicas do nuclídeo U-235 passam a ser mais importantes, conforme é verificado para os casos A1 e C1 na Tabela 3.3.7.1, e como as fissões do nuclídeo U-238 só ocorrem no macrogrupo rápido, o numerador da expressão 3.3.8.1 não apresenta variação notável.

Na Tabela 5.2.16 nota-se também uma redução em torno de 6% quando se eleva a concentração de Pu-240, de 8% para 16%, e em torno de 4% quando esta elevação vai de 16% para 24%.

Tabela 5.2.16
Valores de D-28 via H-TEC - Células de $UO_2-2\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
CASO	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
Varetas com 8% de Pu-240				
A1	3,70605-01	3,70057-01	3,62697-01	3,58872-01
A2	2,46077-01	2,45500-01	2,43417-01	2,41591-01
A3	1,89833-01	1,89360-01	1,88756-01	1,87689-01
A4	1,63899-01	1,63494-01	1,63282-01	1,62514-01
A5	1,34429-01	1,34143-01	1,34197-01	1,33752-01
A6	1,27931-01	1,27676-01	1,27775-01	1,27399-01
Varetas com 16% de Pu-240				
B1	2,29350-01	2,29219-01	2,27130-01	2,25331-01
B2	1,77408-01	1,77208-01	1,76512-01	1,75498-01
B3	1,53423-01	1,53223-01	1,52905-01	1,52197-01
B4	1,26314-01	1,26158-01	1,26104-01	1,25717-01
B5	1,20381-01	1,20241-01	1,20234-01	1,19910-01
Varetas com 24% de Pu-240				
C1	3,29074-01	3,30060-01	3,23285-01	3,18446-01
C2	2,20330-01	2,20466-01	2,18451-01	2,16258-01
C3	1,70287-01	1,70254-01	1,69536-01	1,68338-01
C4	1,47127-01	1,47056-01	1,46690-01	1,45875-01
C5	1,21431-01	1,21359-01	1,21245-01	1,20811-01
C6	1,15465-01	1,15406-01	1,15331-01	1,14980-01

Um aumento da concentração de PuO_2 na vareta combustível de 2% para 4% resulta num aumento de cerca de 40% no valor de D-28, quando se compara os casos C da Tabela 5.2.16 e os casos D da Tabela 5.2.17, tornando clara a importância das fissões térmicas do nuclídeo $Pu-239$. Comparando os casos E4 da Tabela 5.2.18 com os casos D5 da Tabela 5.2.17, verifica-se um aumento no valor de D-28 de cerca de 45% quando se eleva de 4% para 6.6% a concentração de PuO_2 (deve-se lembrar que os casos D apresentam maior

quantidade de Pu-240 que os casos E). Um aumento no valor de D-28 de cerca de 66% é notado (casos E4 e C6) quando se eleva de 2% para 6.6% a quantidade de PuO₂ no combustível.

Tabela 5.2.17
Valores de D-28 via H-TEC - Células de UO₂-4%PuO₂

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	4,73260-01	4,75690-01	4,62730-01	4,57284-01
D2	3,77422-01	3,78299-01	3,71694-01	3,67757-01
D3	2,88346-01	2,88559-01	2,85957-01	2,83686-01
D4	2,47120-01	2,47136-01	2,45811-01	2,44204-01
D5	1,89531-01	1,89446-01	1,89367-01	1,88623-01
D6	1,67412-01	1,67382-01	1,67659-01	1,67251-01
D7	1,61432-01	1,61449-01	1,61882-01	1,61590-01

Tabela 5.2.18
Valores de D-28 via H-TEC - Células de UO₂-6,6%PuO₂

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	8,88037-01	8,97595-01	8,48637-01	8,43604-01
E2	7,33635-01	7,39154-01	7,04454-01	6,99433-01
E3	3,98849-01	3,99202-01	3,91986-01	3,89520-01
E4	3,45061-01	3,45105-01	3,40754-01	3,38870-01
E5	2,31284-01	2,31058-01	2,30641-01	2,29878-01

Aumentando a razão de moderação verifica-se uma redução no valor de D-28 devido ao aumento das taxas de fissão térmica do U-235.

O comportamento de D-28, observado acima, pode ser justificado pelas características físicas dos isótopos do plutônio, discutidas no capítulo anterior, onde nota-se claramente a evidência de dois fenômenos concorrentes :

1) para uma quantidade razoável de plutônio, suas fissões rápidas, principalmente devido aos isótopos Pu-239, Pu-241 e Pu-242, passam a competir com as mesmas fissões do nuclídeo U-238; e

2) para uma quantidade razoável de Pu-239 e Pu-241, suas fissões térmicas e epitérmicas passam a competir com as mesmas fissões do nuclídeo U-235.

Para as células estudadas, o que se nota é uma combinação dos dois fenômenos acima, onde o segundo prevalece sobre o primeiro, reduzindo o denominador da expressão que determina o valor de D-28 .

Pelos resultados aqui apresentados, verifica-se que a mesma observação feita para os valores de D-25, na comparação entre os dois métodos de cálculo do espectro térmico utilizados, também é válida para os valores de D-28.

Valores de D-28 obtidos com a versão que utiliza "cut-off" térmico em 0,625 eV aparecem superestimados, em média cerca de 1%, em relação aos valores obtidos com a versão que utiliza "cut-off" de 1,855 eV. Entretanto, nota-se que, quando se utiliza o método de Carlvik, este fato é invertido para as células mais estreitas que contém maior quantidade de Pu-240 (casos C, D e F), sendo esta diferença inversamente proporcional à razão de moderação e levemente dependente da concentração de PuO₂. Neste ponto nota-se que, estendendo-se a faixa de energia térmica (novo "cut-off"), as taxas de reação devido às ressonâncias dos isótopos do plutônio passam a concorrer com o aumento na taxa de fissão térmica do U-235, pois não se verifica grande acréscimo no denominador da expressão 3.3.8.1, o que provocaria uma redução significativa no valor de D-28 .

Razão de Conversão (CON) .-

A razão entre a captura total de nêutrons do nuclídeo U-238 e a fissão total do U-235 (CON) apresenta comportamento similar aos outros três últimos parâmetros integrais analisados. Verifica-se uma redução média em torno de 2,4% no valor de CON quando se aumenta de 8% para 16% o conteúdo de Pu-240 no PuO_2 , e uma redução média em torno de 1,6% quando se aumenta de 16% para 24%. Esta variação no valor de CON com a quantidade de Pu-240 no combustível é menos significativa para as células com maior razão de moderação, conforme se pode verificar na tabela 5.2.19.

Um aumento de 2% para 4% na concentração de PuO_2 causa um aumento médio em torno de 25% no valor de CON, sendo menor este acréscimo para as células mais térmicas. Isto pode ser verificado comparando os resultados para as células que possuem mesmo "pitch" entre os casos C e D das Tabelas 5.2.19 e 5.2.20, lembrando que as razões de moderação para estes casos são bastante próximas.

Verificando agora os resultados obtidos para os casos D5 e E4 (Tabelas 5.2.20 e 5.2.21), nota-se um aumento de cerca de 41% quando se eleva a concentração de PuO_2 de 4% para 6,6%. Entretanto, deve-se ressaltar aqui que nos casos D, a concentração de Pu-240 é 20,5% maior que nos casos E. Estes dois casos foram escolhidos para comparação por apresentarem razões de moderação muito próximas. Ainda neste sentido, pode-se comparar os valores obtidos de CON para os casos C6 e E4, verificando um aumento de cerca de 53% no valor deste parâmetro quando se eleva de 2% para 6,6% a quantidade de PuO_2 , embora os casos E apresentem maior quantidade de Pu-240.

Semelhante ao que ocorre para os outros parâmetros integrais celulares, o valor de CON diminui com o aumento da razão de moderação. Resultados obtidos utilizando o método de Carlvik para o cálculo do espectro térmico aparecem superestimados em média cerca de 1,5% em relação aos valores obtidos quando se utiliza o procedimento padrão do Thermos. Esta situação se torna menos aparente e até mesmo contrária para as células mais térmicas, conforme é verificado para os casos D6 e D7.

Tabela 5.2.19
Valores da CON via H-TEC - Células de $UO_2-2\%PuO_2$

CASO	Energia de corte térmica (Cut-off)			
	METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
	0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
Varetas com 8% de Pu-240				
A1	2,65362+00	2,65200+00	2,61110+00	2,58991+00
A2	1,90347+00	1,90139+00	1,88990+00	1,88064+00
A3	1,56588+00	1,56416+00	1,56066+00	1,55565+00
A4	1,40692+00	1,40546+00	1,40404+00	1,40062+00
A5	1,22107+00	1,22007+00	1,22010+00	1,21828+00
A6	1,17563+00	1,17475+00	1,17503+00	1,17355+00
Varetas com 16% de Pu-240				
B1	1,82923+00	1,82915+00	1,81779+00	1,80841+00
B2	1,51214+00	1,51153+00	1,50777+00	1,50282+00
B3	1,36302+00	1,36233+00	1,36060+00	1,35729+00
B4	1,18903+00	1,18845+00	1,18816+00	1,18646+00
B5	1,14658+00	1,14604+00	1,14602+00	1,14463+00
Varetas com 24% de Pu-240				
C1	2,47231+00	2,47827+00	2,44044+00	2,41266+00
C2	1,78779+00	1,78877+00	1,77806+00	1,76635+00
C3	1,48084+00	1,48079+00	1,47717+00	1,47108+00
C4	1,33658+00	1,33628+00	1,33453+00	1,33053+00
C5	1,16955+00	1,16916+00	1,16879+00	1,16672+00
C6	1,12788+00	1,12752+00	1,12739+00	1,12573+00

Tabela 5.2.20
Valores da CON via H-TEC - Células de UO₂-4%PuO₂

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERNOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	3,12870+00	3,14363+00	3,07328+00	3,04524+00
D2	2,55127+00	2,55620+00	2,52212+00	2,50172+00
D3	2,02853+00	2,02978+00	2,01685+00	2,00566+00
D4	1,78083+00	1,78101+00	1,77459+00	1,76697+00
D5	1,42106+00	1,42061+00	1,42029+00	1,41700+00
D6	1,26118+00	1,26087+00	1,26210+00	1,26035+00
D7	1,20993+00	1,20975+00	1,21154+00	1,21026+00

Tabela 5.2.21
Valores da CON via H-TEC - Células de UO₂-6,6%PuO₂

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERNOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	5,66873+00	5,72691+00	5,44578+00	5,41734+00
E2	4,76739+00	4,80195+00	4,60313+00	4,57542+00
E3	2,74944+00	2,75311+00	2,71268+00	2,70054+00
E4	2,41628+00	2,41801+00	2,39366+00	2,38480+00
E5	1,68892+00	1,68861+00	1,68565+00	1,68272+00

Comparando os resultados obtidos com as duas energias de corte térmicas estudadas, verifica-se que :

1) utilizando o método de Carlvik no cálculo do espectro de nêutrons térmicos, os valores obtidos com o maior "cut-off" aparecem subestimados para todos os casos A e B, invertendo a situação para as células mais epitérmicas dos casos C, D e E;

2) utilizando o procedimento padrão do Thermos, os valores obtidos com o maior "cut-off" aparecem subestimados em relação aos valores com o "cut-off" original para todos os casos estudados.

O comportamento deste parâmetro conforme a segunda observação anotada acima coincide com o comportamento de D-28 explicado anteriormente. Quanto à primeira observação, cabe ressaltar que o método de Carlvik é mais efetivo para as células mais estreitas, onde se nota alta fuga de nêutrons. Quanto maior for a concentração de PuO_2 ou Pu-240 nestas células, maior será a blindagem do fluxo térmico, sendo este efeito ainda mais acentuado quando se inclui as ressonâncias dos isótopos do plutônio na região de energias térmicas.

Na referência / 73 / encontra-se uma rica fonte de análise dos parâmetros integrais celulares. Alguns resultados publicados nessa referência, são reproduzidos aqui (Tabela 5.2.22), comparando-os com os obtidos com o sistema HAMMER-TECHNION para as duas versões estudadas. Para a obtenção destes resultados, utilizou-se o método de Carlvik no cálculo do espectro térmico, e considerou-se "up-scattering" nas três regiões celulares, sendo a região do combustível dividida em 7 "mesh-points", a do revestimento em 3 "mesh-points" e a região do moderador, a qual é composta de uma mistura de água leve com boro, foi dividida em 10 "mesh-points". A vareta combustível é constituída de UO_2 -2% PuO_2 (8%Pu240), semelhante aos casos A apresentados na Tabela 2.1.1.2. Os resultados referem-se à célula de menor "pitch" (0,8697 polegadas) e "buckling" geométrico igual a $1,0\text{E}-10$ (isto é, considerando fuga nula); as concentrações atômicas e demais parâmetros de entrada foram obtidos das referências / 65 / e / 76 /.

Tabela 5.2.22
Parâmetros Celulares Integrais calculados (dados ref./ 73 /)

PARÂM.	SISTEMA COMPUTACIONAL					
	PX-KENO	MCNP	VIM-BNL	EPRI-CELL	H-TEC	H-TEC*
K-inf	1,1811	1,1749	1,1683	1,1725	1,1778	1,1746
R-28	2,5900	2,5968	2,6710	2,5440	2,4517	2,2748
D-25	0,1492	0,1513	0,1544	0,1423	0,1645	0,1318
D-28	0,2952	0,2968	0,3024	0,2977	0,2776	0,2785
CON	2,1394	2,1404	2,1790	2,1230	2,0171	2,0240

H-TEC* = versão com o novo "cut-off" térmico.

5.3 - Parâmetros Celulares Homogeneizados e

Colapsados em 4 grupos de energia . -

As constantes de grupos que serão apresentadas aqui foram definidas na seção 3.4 . Assim como nas duas seções anteriores, os valores destas grandezas obtidas com as duas versões de "cut-off" térmicos, são confrontados a seguir. Atenção deve ser dada ao fato de que, como era de se esperar, os valores destes parâmetros para os dois primeiros macrogrupos, os mais energéticos, permanecem inalterados quando se eleva a energia de corte térmica. A influência da separação das faixas de energia rápida e térmica é notada no terceiro e quarto macrogrupos, os quais correspondem ao último macrogrupo epitérmico e ao macrogrupo térmico, respectivamente.

Poder-se-á verificar a seguir que, a escolha do método de Carlvik, para o cálculo do espectro de nêutrons térmicos, não influencia na determinação dos parâmetros homogeneizados e colapsados para os três primeiros macrogrupos. Somente o quarto macrogrupo (térmico) apresenta diferenças entre os valores dos parâmetros apresentados nesta seção quando se compara os resultados obtidos com o método de Carlvik e os obtidos com o procedimento padrão do Thermos.

Coefficiente de Difusão Térmico (D_{th}) . -

Nos resultados apresentados nas Tabelas 5.3.1, 5.3.2 e 5.3.3, pode-se verificar que o valor do coeficiente de difusão térmico da célula (D para $I=4$) decresce com o aumento da razão de moderação. Para as células com 2% e 4% de PuO_2 , nota-se um decréscimo médio de cerca de 21% e 24% no valor de D_{th} , quando se utilizam o "cut-off" de 0,625 eV e 1,855 eV, respectivamente. Para as células com 6,6% de PuO_2 , aumentando a razão de moderação de 1,680 para 5,660, verifica-se uma redução média de 25% e 31% no valor de D_{th} para os dois "cut-off" respectivamente. Este comportamento com a moderação celular é esperado da própria definição deste parâmetro (seção 3.4.2), uma vez que quanto mais moderado for o sistema, maior será a densidade de nêutrons térmicos, como pode ser visto na Tabela 3.4.1.1, apresentada no capítulo 3.

Na Tabela 5.3.1, nota-se um acréscimo médio em torno de 0,1% e 0,04% quando se aumenta de 8% para 16% e de 16% para 24% a quantidade de Pu-240 no PuO_2 , quando se utiliza a versão original do sistema HAMMER-TECHNION, sendo a variação pouco expressiva para as células mais térmicas. O oposto é observado quando a versão com o novo "cut-off" é utilizada, notando-se um decréscimo médio de 0,5% no valor de D_{th} quando se aumenta de 8% para 16% e de 16% para 24% a quantidade de Pu-240.

Comparando agora os casos C e D, nota-se uma leve diminuição no valor de D_{th} quando se aumenta de 2% para 4% a concentração de PuO_2 , utilizando o "cut-off" original. O oposto é observado quando se utiliza o novo "cut-off", chegando a superestimar o valor de D_{th} em 1,75% em relação ao obtido com o "cut-off" original.

Aumentando de 4% para 6,6% a concentração de PuO_2 na vareta combustível, nota-se um aumento médio de 7,36% e de 11,4% quando se utiliza o "cut-off" original e o novo respectivamente, devendo ressaltar que os casos com 4% de PuO_2 possuem maior quantidade de Pu-240. Comparando os resultados para os casos C6 e E4, verifica-se a mesma porcentagem de aumento no valor de D_{th} quando se aumenta de 2% para 6,6% a concentração de PuO_2 .

O efeito do método de Carlvik no valor de D_{th} é superestimar levemente o valor deste parâmetro em relação ao método padrão do Thermos. Este efeito pode aparecer invertido para as células mais térmicas com 2% de PuO_2 .

Estendendo-se a faixa de energia térmica, verifica-se um aumento no valor de D_{th} que chega até 22% para a célula mais estreita contendo 6,6% de PuO_2 , e até 5,5% para a célula mais térmica contendo 4% de PuO_2 .

A diferença entre os valores de D_{th} calculados com ambas as energias de corte térmicas estudadas demonstra ser inversamente proporcional à quantidade de Pu-240, conforme pode ser visto na tabela 5.3.1. Esta diferença é cerca de 5,9% no caso C6, 7,44% no caso D5 e 12,54% no caso E4, os quais possuem uma quantidade de Pu-240 muito próximas, porém diferentes concentrações de PuO_2 .

A influência das ressonâncias dos isótopos do plutônio, no cálculo do coeficiente de difusão térmico da célula, foi analisada no capítulo 4.

A Tabela 5.3.1 apresenta os valores de D_{th} calculados para as células de $UO_2-2\%PuO_2$.

Tabela 5.3.1
Valores da D_{th} via H-TEC - Células de $UO_2-2\%PuO_2$

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
4 → 4	A1	2,54720-01	2,90079-01	2,52314-01	2,84155-01
	A2	2,15598-01	2,40522-01	2,14776-01	2,38395-01
	A3	1,95670-01	2,14815-01	1,95458-01	2,14043-01
	A4	1,85548-01	2,01640-01	1,85474-01	2,01258-01
	A5	1,73130-01	1,85351-01	1,73153-01	1,85256-01
	A6	1,69936-01	1,81142-01	1,69970-01	1,81098-01
GRUPO	CASO	Varetas com 16% de Pu-240			
4 → 4	B1	2,16106-01	2,39159-01	2,15303-01	2,37223-01
	B2	1,95981-01	2,13866-01	1,95794-01	2,13223-01
	B3	1,85784-01	2,00934-01	1,85734-01	2,00629-01
	B4	1,73305-01	1,84920-01	1,73343-01	1,84869-01
	B5	1,70096-01	1,80782-01	1,70145-01	1,80772-01
GRUPO	CASO	Varetas com 24% de Pu-240			
4 → 4	C1	2,56290-01	2,35121-01	2,53880-01	2,79997-01
	C2	2,16290-01	2,37527-01	2,15512-01	2,35792-01
	C3	1,96072-01	2,12802-01	1,95899-01	2,12254-01
	C4	1,85834-01	2,00105-01	1,85797-01	1,99879-01
	C5	1,73327-01	1,84395-01	1,73373-01	1,84385-01
	C6	1,70101-01	1,80307-01	1,70159-01	1,80334-01

Os valores de D_{th} calculados para as células com 4% e 6,6% de PuO_2 são apresentados nas Tabelas 5.3.2 e 5.3.3, respectivamente.

Tabela 5.3.2
Valores da D_{th} via H-TEC - Células de UO_2 -4% PuO_2

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
4 → 4	D1	2,33691-01	2,66922-01	2,31435-01	2,62357-01
	D2	2,14222-01	2,41767-01	2,12977-01	2,39226-01
	D3	1,95127-01	2,16608-01	1,94617-01	2,15550-01
	D4	1,85258-01	2,03404-01	1,84963-01	2,02800-01
	D5	1,69846-01	1,82483-01	1,69766-01	1,82328-01
	D6	1,62548-01	1,72437-01	1,62502-01	1,72366-01
	D7	1,60181-01	1,69149-01	1,60129-01	1,69074-01

Tabela 5.3.3
Valores da D_{th} via H-TEC - Células de UO_2 -6,6% PuO_2

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
4 → 4	E1	2,44535-01	2,98611-01	2,41083-01	2,88566-01
	E2	2,28610-01	2,74656-01	2,26050-01	2,67475-01
	E3	1,90851-01	2,17534-01	1,90175-01	2,15726-01
	E4	1,83350-01	2,06352-01	1,82891-01	2,05136-01
	E5	1,65864-01	1,79823-01	1,65748-01	1,79532-01

Secção de Choque de Absorção Térmica ($\Sigma_{a, th}$)

Como já foi comentado na secção 3.4.3, o valor da secção de choque de absorção térmica macroscópica e homogeneizada em toda a célula unitária decresce com o aumento da razão de moderação da célula. Para as células com 2% de PuO_2 , este decréscimo é em média 50% quando se eleva de 1,987 para 5,635 a razão VM/VF . Para os casos com 4% de PuO_2 , este decréscimo é em média 54% para uma elevação de 1,993 para 5,647 na razão VM/VF , notando-se o mesmo decréscimo para as células com 6,6% de PuO_2 quando a razão de moderação vai de 1,68 para 5,66.

Na Tabela 5.3.4 verifica-se uma redução média no valor de $\Sigma_{a, th}$ em torno de 3,5% quando se aumenta de 8% para 16% a concentração de $Pu-240$ no PuO_2 e uma redução média de 2,5% quando esta concentração passa de 16% para 24%. Essa redução no valor de $\Sigma_{a, th}$ com o aumento da quantidade de $Pu-240$ é mais significativa para as células mais apertadas do que para as células mais térmicas e, opostamente ao que se observou para o coeficiente de difusão térmico D_{th} , este mesmo comportamento é verificado quando se utiliza ambas as energias de corte térmica estudadas.

Aumentando de 2% para 4% o conteúdo de PuO_2 na vareta combustível, nota-se um aumento médio de cerca de 25% no valor de $\Sigma_{a, th}$, sendo este aumento inversamente proporcional a razão de moderação e semelhante para os cálculos com os dois "cut-off" utilizados.

As Tabelas 5.3.4 e 5.3.5 apresentam os valores de $\Sigma_{a, th}$ calculados para as células com 2% de PuO_2 e 4% de PuO_2 , respectivamente.

Tabela 5.3.4
Valores da $\Sigma_{a,th}$ via H-TEC - Células de UO_2 -2% PuO_2

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
4 → 4	A1	1,58763-01	1,41901-01	1,51319-01	1,35158-01
	A2	1,16896-01	1,08605-01	1,13990-01	1,05597-01
	A3	9,21536-02	8,72504-02	9,09739-02	8,58900-02
	A4	7,86560-02	7,51613-02	7,80122-02	7,43713-02
	A5	6,12710-02	5,91918-02	6,10416-02	5,88812-02
	A6	5,66414-02	5,48668-02	5,64789-02	5,46421-02
GRUPO	CASO	Varetas com 16% de Pu-240			
4 → 4	B1	1,11548-01	1,05323-01	1,09064-01	1,02383-01
	B2	8,83584-02	8,46238-02	8,73847-02	8,33062-02
	B3	7,56679-02	7,29703-02	7,51560-02	7,22140-02
	B4	5,92692-02	5,76202-01	5,91049-02	5,73274-02
	B5	5,48912-02	5,34685-02	5,47802-02	5,32591-02
GRUPO	CASO	Varetas com 24% de Pu-240			
4 → 4	C1	1,44961-01	1,36393-01	1,39253-01	1,29313-01
	C2	1,07865-01	1,03541-01	1,05691-01	1,00459-01
	C3	8,57604-02	8,31079-02	8,49357-02	8,17129-02
	C4	7,36289-02	7,16737-02	7,32099-02	7,08647-02
	C5	5,79100-02	5,66641-02	5,77890-02	5,63413-02
	C6	5,37046-02	5,26140-02	5,36279-02	5,23795-02

Comparando os casos D5 e E4, apresentados nas Tabelas 5.3.5 e 5.3.6 respectivamente, apesar do primeiro possuir maior quantidade de Pu-240 que o segundo, os valores de $\Sigma_{a,th}$ para este último apresentam-se superestimados cerca de 48% em relação ao primeiro. O mesmo acontecendo quando se compara os casos C6 e E4, onde a diferença média fica em torno de 55%.

Similarmente ao que ocorre com os valores de D_{th} , os valores obtidos de $\Sigma_{a,th}$ quando

se utiliza o método de Carlvik, aparecem superestimados em relação aos obtidos sem este método. A diferença varia de 13% para a célula mais apertada com 6,6% de PuO_2 até 0,4% para a célula mais espaçada com 2% de PuO_2 .

Tabela 5.3.5
Valores da $\Sigma_{a,th}$ via H-TEC - Células de UO_2 -4% PuO_2

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
4 → 4	D1	1,83883-01	1,68021-01	1,73494-01	1,56717-01
	D2	1,50830-01	1,40620-01	1,44776-01	1,33534-01
	D3	1,13196-01	1,10377-01	1,13380-01	1,06784-01
	D4	9,75292-02	9,34876-02	9,58121-02	9,12071-02
	D5	6,75671-02	6,56169-02	6,69702-02	6,47795-02
	D6	5,31558-02	5,19090-02	5,28181-02	5,14490-02
	D7	4,84953-02	4,74395-02	4,81911-02	4,70446-02

Tabela 5.3.6
Valores da $\Sigma_{a,th}$ via H-TEC - Células de UO_2 -6,6% PuO_2

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
4 → 4	E1	3,28393-01	2,67548-01	2,85533-01	2,35193-01
	E2	2,78688-01	2,36032-01	2,48185-01	2,11063-01
	E3	1,52803-01	1,40768-01	1,45404-01	1,33402-01
	E4	1,30412-01	1,21700-01	1,25495-01	1,16700-01
	E5	7,64806-02	7,35413-02	7,52679-02	7,22049-02

Contrariamente ao que se observa para o D_{th} , o aumento da energia de corte térmica subestima os valores de $\Sigma_{a, th}$, sendo esta tendência inversamente proporcional à razão de moderação. A maior variação (18,5%) ocorre para a célula mais apertada (caso E1), e a menor, em torno de 2%, para as células mais térmicas que contém maior quantidade de Pu-240 (casos C6 e D7). Comparando os casos C6, D5 e E4, pode-se notar que quanto maior a quantidade de PuO_2 na vareta combustível, maior é a diferença entre os valores calculados de $\Sigma_{a, th}$ com os dois "cut-off" estudados.

Número médio de nêutrons de fissão vezes secção de
choque de fissão térmica ($\nu \Sigma_{f, th}$) . -

Os resultados apresentados na Tabela 5.3.7 mostram que um aumento de 8% para 16% na quantidade de Pu-240 na vareta combustível provoca uma redução média de 6,3% no valor de $\nu \Sigma_{f, th}$. O mesmo percentual é verificado quando se passa de 16% para 24% a quantidade deste nuclídeo. Esta dependência da quantidade de Pu-240 é mais significativa para as células mais apertada. Considerando os resultados obtidos com a versão que utiliza o novo "cut-off" térmico, esta redução no valor de $\nu \Sigma_{f, th}$ com o aumento da quantidade de Pu-240 é levemente menos acentuada, cerca de 0,5% menor que a variação com a versão que utiliza o "cut-off" original. Comparando agora os resultados apresentados na Tabela 5.3.7 com os da Tabela 5.3.8, nota-se um aumento médio no valor deste parâmetro de 31% quando se aumenta de 2% para 4% a concentração de PuO_2 na vareta combustível, também sendo mais expressiva esta variação quanto mais apertada for a célula e idêntica para os dois "cut-off" utilizados.

Tabela 5.3.7
Valores da $\nu\Sigma_f$ th via H-TEC - Células de $UO_2-2\%PuO_2$

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
4 → 4	A1	2,65730-01	2,23935-01	2,52671-01	2,14819-01
	A2	1,87860-01	1,67829-01	1,82724-01	1,63548-01
	A3	1,41107-01	1,29759-01	1,39029-01	1,27829-01
	A4	1,15383-01	1,07636-01	1,14254-01	1,06528-01
	A5	8,20225-02	7,78484-02	8,16253-02	7,74239-02
	A6	7,30964-02	6,96767-02	7,28157-02	6,93732-02
GRUPO	CASO	Varetas com 16% de Pu-240			
4 → 4	B1	1,75199-01	1,57465-01	1,70831-01	1,53776-01
	B2	1,31889-01	1,21771-01	1,30186-01	1,20165-01
	B3	1,08008-01	1,01066-01	1,07119-01	1,00176-01
	B4	7,69636-02	7,31913-02	7,66852-02	7,28750-02
	B5	6,86409-02	6,55409-02	6,84547-02	6,53256-02
GRUPO	CASO	Varetas com 24% de Pu-240			
4 → 4	C1	2,30375-01	1,97801-01	2,20504-01	1,90664-01
	C2	1,63672-01	1,47783-01	1,59892-01	1,44548-01
	C3	1,23418-01	1,14287-01	1,21992-01	1,12918-01
	C4	1,01181-01	9,48871-02	1,00463-01	9,41490-02
	C5	7,22230-02	6,87741-02	7,20222-02	6,85298-02
	C6	6,44469-02	6,16080-02	6,43219-02	6,14491-02

Também na Tabela 5.3.7, verifica-se um decréscimo de $\nu\Sigma_f$ th, de cerca de 50%, quando se aumenta a razão de moderação VM/VF de 1,987 para 5,637. Para as células com 4% PuO_2 , apresentadas na Tabela 5.3.8, aumentando de 1,993 para 5,647 a razão VM/VF, verifica-se um decréscimo médio de 61% no valor de $\nu\Sigma_f$ th, o mesmo acontecendo (Tabela

5.3.9) quando se eleva de 1,68 para 5,66 a razão VM/VF nas células com 6.6% de PuO₂.

Aumentando de 4% para 6,6% a concentração de PuO₂ (casos D5 e E4) nota-se um acréscimo médio de cerca de 55% no valor de $\nu\Sigma_f$ th, e entre os casos C6 e E4 (2% e 6,6% de PuO₂ respectivamente) nota-se um aumento médio de 69% no valor deste parâmetro.

Tabela 5.3.8
Valores da $\nu\Sigma_f$ th via H-TEC - Células de UO₂-4%PuO₂

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
4 → 4	D1	3,08657-01	2,58631-01	2,90483-01	2,45666-01
	D2	2,48401-01	2,16220-01	2,37733-01	2,07793-01
	D3	1,84381-01	1,66423-01	1,79389-01	1,62059-01
	D4	1,49507-01	1,37415-01	1,46450-01	1,34620-01
	D5	9,29884-02	8,78350-02	9,19099-02	8,67879-02
	D6	6,55578-02	6,26971-02	6,49339-02	6,20910-02
	D7	5,66496-02	5,43915-02	5,60793-02	5,38403-02

Tabela 5.3.9
Valores da $\nu\Sigma_f$ th via H-TEC - Células de UO₂-6,6%PuO₂

		Energia de corte térmica (Cut-off)			
		METODO DE CARLVIK		THERMOS PADRÃO	
		0,625 eV	1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
GRUPO	CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
4 → 4	E1	5,85149-01	4,31050-01	5,09942-01	3,90343-01
	E2	4,95008-01	3,85679-01	4,41156-01	3,52590-01
	E3	2,60792-01	2,29791-01	2,47485-01	2,18997-01
	E4	2,18036-01	1,96029-01	2,09146-01	1,88488-01
	E5	1,13725-01	1,07032-01	1,11494-01	1,04949-01

Em todos os casos analisados aqui, o método de Carlvik para o cálculo do espectro térmico superestima os valores de $\nu\Sigma_{f,th}$ em relação aos obtidos com o procedimento padrão do Thermos. A diferença vai desde 12,8% para a célula mais estreita ("pitch" = 0,52 polegadas – caso E1) até 0,2% para a célula do caso C6.

Analogamente ao que ocorre com a $\Sigma_{a,th}$, valores de $\nu\Sigma_{f,th}$ obtidos com a versão que utiliza o novo "cut-off" aparecem subestimados em relação aos obtidos com a versão original. A maior diferença (cerca de 26%) ocorre para a célula mais apertada (caso E1), e a menor (cerca de 3,98%) aparece no caso D7. Novamente, verifica-se que as discrepâncias nos valores de $\nu\Sigma_{f,th}$ obtidos com as duas energias de corte térmica são mais expressivas quanto maior for a quantidade de PuO_2 na vareta combustível.

De uma maneira geral, uma vez que os maiores absorvedores e elementos físseis se encontram na região do combustível, é de se esperar que quanto mais diluída for esta região, isto é, quanto maior a razão VM/VF, menor será o valor das secções de choque homogeneizadas de absorção e fissão. Isto também explica o fato de que, quanto mais apertada for a célula, mais acentuados são os efeitos destas constantes de grupo analisadas neste trabalho. As células mais estreitas apresentam um espectro mais "duro", que tende a se agravar quando se tem maior quantidade de plutônio no sistema.

5.4 – Tempo de computação gasto no processamento do sistema HAMMER-TECHNION . –

A verificação do tempo dispendido no processamento de um sistema computacional é importante na avaliação da viabilidade do código.

O sistema HAMMER-TECHNION, para os casos celulares geralmente estudados, é de grande valia visto a eficiente e rápida convergência alcançada nos cálculos iterativos da equação de transporte de nêutrons utilizada, o que resulta em um tempo de computação relativamente pequeno, quando comparado com outros códigos de análise celular. O objetivo aqui é confrontar resultados obtidos para as duas versões utilizadas.

Dos dados apresentados nas Tabelas 5.4.1, 5.4.2 e 5.4.3, pode-se ver que o tempo gasto para atingir a convergência nos cálculos da região de energias térmicas, como era de se esperar, é proporcional ao número de iterações necessárias para a convergência. Este, por sua vez, aumenta com o aumento da razão de moderação da célula; todavia demonstra ser independente da concentração de PuO_2 na célula.

Na elaboração das tabelas apresentadas nesta seção, utilizou-se o sistema computacional CDC/CYBER 180/830. As colunas identificadas como tempo de iteração, dado em segundos, referem-se ao tempo de computação utilizado para se atingir a convergência da equação de transporte no programa Thermos, e as colunas identificadas como tempo de execução, também dado em segundos, referem-se ao tempo de execução total do sistema HAMMER-TECHNION.

Tabela 5.4.1
Tempo de execução do H-TEC - Células com 2% PuO₂ - s/CARLVIX

CASO	CUT-OFF=0,625 eV			CUT-OFF = 1,855 eV		
	numero itera.	tempo iteração	tempo execução	numero itera.	tempo iteração	tempo execução
Varetas com 8 % de Pu-240						
A1	7	5,562	157,769	10	8,951	173,591
A2	10	7,479	155,019	14	11,926	170,790
A3	12	8,563	153,820	17	14,532	169,763
A4	14	9,647	153,907	20	16,312	169,614
A5	19	12,086	154,913	26	20,689	171,080
A6	21	12,941	154,816	27	22,084	171,299
Varetas com 16 % de Pu-240						
B1	11	7,488	155,009	14	11,948	170,318
B2	13	8,604	154,375	17	14,545	169,309
B3	15	9,689	154,039	20	16,291	169,060
B4	19	11,843	154,312	26	20,662	170,033
B5	21	12,924	154,762	28	22,153	171,017
Varetas com 24 % de Pu-240						
C1	8	5,579	158,227	10	8,966	173,063
C2	11	7,493	156,075	14	11,887	170,071
C3	13	8,584	154,815	17	14,518	169,539
C4	15	9,704	154,796	20	16,287	169,466
C5	19	11,866	155,220	26	20,657	170,435
C6	21	12,974	155,644	28	22,072	170,992

Confrontando os resultados obtidos para ambas as versões utilizadas, nota-se que o tempo necessário para iteração dos cálculos térmicos é em média 65% maior quando se utiliza a versão que possui "cut-off" térmico em 1,855 eV e estrutura de 33 multigrupos de energia em relação à versão original com estrutura de 30 multigrupos térmicos.

Tabela 5.4.2
Tempo de execução do H-TEC - Células com 4% PuO₂ - s/CARLVIE

CASO	CUT-OFF=0,625 eV			CUT-OFF = 1,855 eV		
	numero itera.	tempo iteração	tempo execução	numero itera.	tempo iteração	tempo execução
Varetas com 18 % de Pu-240						
D1	9	6,407	156,295	12	10,338	169,215
D2	11	7,490	155,157	14	11,861	163,135
D3	14	8,863	154,118	18	14,824	168,267
D4	16	9,910	153,928	21	17,375	168,888
D5	22	13,172	155,154	29	23,181	171,462
D6	27	16,170	156,948	36	27,862	174,260
D7	30	17,505	158,091	40	30,747	176,301

Tabela 5.4.3
Tempo de execução do H-TEC - Células com 6,6% PuO₂ - s/CARLVIE

CASO	CUT-OFF=0,625 eV			CUT-OFF = 1,855 eV		
	numero itera.	tempo iteração	tempo execução	numero itera.	tempo iteracao	tempo execucao
Varetas com 8,57% de Pu-240						
E1	7	5,293	164,493	9	8,654	182,813
E2	7	5,294	162,452	9	8,623	179,078
E3	11	7,500	159,607	15	12,973	175,026
E4	13	8,564	158,625	17	14,429	173,606
E5	19	11,815	158,811	25	20,263	174,307

Como a maior parte do tempo de execução total é dispendido nos cálculos realizados pelo método de Nordheim no tratamento das ressonâncias, desenvolvido nas subrotinas do programa HAMLET (região de energias não térmicas), não se verifica alteração significativa neste tempo de execução total quando se confrontam resultados com ambas as

versões utilizadas.

Pelo menos para os casos analisados neste trabalho, o tempo gasto, tanto na região de energia térmica quanto na rápida e epitérmica, não se altera quando se utiliza o método de Carlvik ao invés do método padrão do Thermos; por essa razão, apenas um destes dois métodos foi considerado nesta seção.

5.5 – Resultados Obtidos com o programa CITATION . –

No processamento do código CITATION, considerou-se o reator como um cilindro circular reto de duas regiões. O núcleo do reator consiste de uma mistura homogênea da célula unitária em questão, com altura física equivalente à altura ativa da vareta combustível. Utilizou-se 30 cm de espessura para a região refletora, sendo esta dividida em 30 "meshs"; as secções de choque em poucos grupos para esta região, composta de água pura, foram calculadas no sistema HAMMER-TECHNION para um meio infinito de água. O raio crítico foi determinado pela expressão 5.5.1 para as células de "pitch" quadrado, e pela expressão 5.5.2 para as células de "pitch" triangular.

$$R_c = l \sqrt{(N_c / \pi)} \quad (5.5.1)$$

$$R_c = l \sqrt{ N_c \sqrt{3} / 2 \pi } \quad (5.5.2)$$

onde : l = "pitch" da célula ;

N_c = número de varetas crítico.

As constantes de grupo térmicas homogeneizadas que servem como dados de entrada na execução do código CITATION, cujos valores foram apresentados na seção 5.3, apresentam resultados diferentes para os dois métodos de cálculo do espectro térmico utilizados (o método de Carlvik e o método padrão do Thermos). Resultados de k_{ef} com estas constantes de grupo geradas com ambos os métodos foram obtidos com o código CITATION, cujos valores estão mostrados nas Tabelas 5.5.1, 5.5.2 e 5.5.3.

Tabela 5.5.1
 Valores de k_{ef} via CITATION – Células de UO_2 -2% PuO_2

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIE			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	0,9954478	0,9907199	0,9925477	0,9955826
A2	1,0047245	1,0030518	1,0017738	1,0042362
A3	1,0032530	1,0027466	1,0010662	1,0028801
A4	1,0097532	1,0095100	1,0079947	1,0093575
A5	1,0098257	1,0094843	1,0086727	1,0091429
A6	1,0071669	1,0067234	1,0061855	1,0063543
CASO	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	1,0192890	1,0162239	1,0162907	1,0197029
B2	1,0168619	1,0152826	1,0147915	1,0170975
B3	1,0184746	1,0173664	1,0168972	1,0165566
B4	1,0166864	1,0157347	1,0158167	1,0163412
B5	1,0135412	1,0125113	1,0125380	1,0130167
CASO	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	0,9977952	0,9898326	0,9941974	1,0029430
C2	1,0014296	0,9973983	0,9983344	1,0039654
C3	1,0036955	1,0013962	1,0016718	1,0054655
C4	1,0072584	1,0055771	1,0057993	1,0086155
C5	1,0050583	1,0036640	1,0043678	1,0055828
C6	1,0023766	1,0009089	1,0018644	1,0026245

Os resultados para o fator de multiplicação efetivo de nêutrons (k_{ef}) obtidos com o código CITATION, apresentados nesta seção, pelo menos para os casos analisados neste trabalho, apresentam-se mais próximos do valor experimental do que os valores obtidos com o sistema HAMMER-TECHNION, apresentados na seção 5.1 .

Tabela 5.5.2
Valores de k_{ef} via CITATION - Células de $UO_2-4\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	1,0012426	0,9932003	0,9981017	1,0070267
D2	1,0006914	0,9954292	0,9972488	1,0045195
D3	1,0109777	1,0081482	1,0076828	1,0131121
D4	1,0102253	1,0083952	1,0070524	1,0114450
D5	1,0117149	1,0105219	1,0088453	1,0109644
D6	1,0093031	1,0077600	1,0061712	1,0067825
D7	1,0086536	1,0067759	1,0049114	1,0048990

Tabela 5.5.3
Valores de k_{ef} via CITATION - Células de $UO_2-6,6\%PuO_2$

Energia de corte térmica (Cut-off)				
METODO DE CARLVIK			THERMOS PADRÃO	
0,625 eV		1,855 eV	0,625 eV	1,855 eV
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	0,9943719	0,9811875	0,9941826	1,0015554
E2	0,9980226	0,9883387	0,9966452	1,0038948
E3	1,0050020	1,0030279	1,0010490	1,0062647
E4	1,0026484	1,0077715	1,0045891	1,0091362
E5	1,0230742	1,0232277	1,0188160	1,0212240

Os valores de k_{ef} obtidos com as constantes de grupo, geradas com o método de Carlvik, apresentam-se em média cerca de 0,4% maiores que os obtidos quando se utiliza

as constantes geradas com o método padrão do Thermos, com a energia de corte térmica em 0,625 eV. Para as células com 2% PuO₂ esta diferença é tanto maior quanto mais apertada for a célula. Para os demais casos (4% e 6.6% de PuO₂) não se verifica nenhuma tendência desta diferença com o "pitch" da célula. Quando se utiliza a versão com energia de corte térmica em 1,855 eV, nota-se que os valores de k_{ef} obtidos com as constantes de grupo via método de Carlvik são melhores que os obtidos com as constantes de grupo via método padrão do Thermos (método de Honeck). A diferença, para todas as células estudadas, novamente é tanto mais expressiva quanto mais apertada for a célula.

É importante ressaltar aqui que a mesma observação acima vale para os valores de k_{ef} obtidos com o sistema HAMMER-TECHNION (conforme seção 5.1). Inclusive as diferenças de k_{ef} obtidos com ambos os métodos e ambas as energias de corte térmica, ocorrem nas mesmas proporções que as verificadas com o código CITATION.

Analisando os resultados apresentadas nesta seção juntamente com as Tabelas 5.1.1, 5.1.2 e 5.1.3, verifica-se que os valores de k_{ef} obtidos via CITATION apresentam o mesmo comportamento em função da energia de corte térmica que o apresentado pelos resultados obtidos via HAMMER-TECHNION, embora a diferença dos valores de k_{ef} seja levemente menor com o código CITATION. A maior diferença $\Delta k = +1,325\%$, onde $\Delta k = ((k_1 - k_2)/k_1)\%$ ($k_1 =$ valor obtido com o "cut-off" de 0,625 eV e $k_2 =$ valor obtido com o "cut-off" de 1,855 eV), aparece para o caso E1, e a menor diferença $\Delta k = -0,015\%$ para o caso E6, quando se utiliza o método de Carlvik. Com o método padrão do Thermos a maior Δk (-0,89%) é verificada para o caso D1 e a menor $\Delta k = +0,0012\%$ para o caso D7.

As Figuras 5.5.1 a 5.5.4 mostram que a curva de k_{ef} em função do "pitch", construída a partir dos resultados obtidos com o código CITATION, é mais suave para todos os casos analisados, do que aquela construída com os resultados obtidos com o sistema HAMMER-TECHNION. Com exceção dos resultados obtidos para as células

correspondentes aos casos B, as quais não possuem dados muito precisos, sendo verificado muitas discrepâncias nas referências consultadas, os demais resultados apresentam boa concordância com os obtidos com os outros códigos que utilizam a teoria de difusão, como o HFN, já comentado anteriormente. Em geral os valores obtidos com este código aparecem levemente subestimados (em média cerca de 500 pcm) em relação aos valores obtidos com o código CITATION; a maior diferença (1200 pcm) cabe ao caso A3.

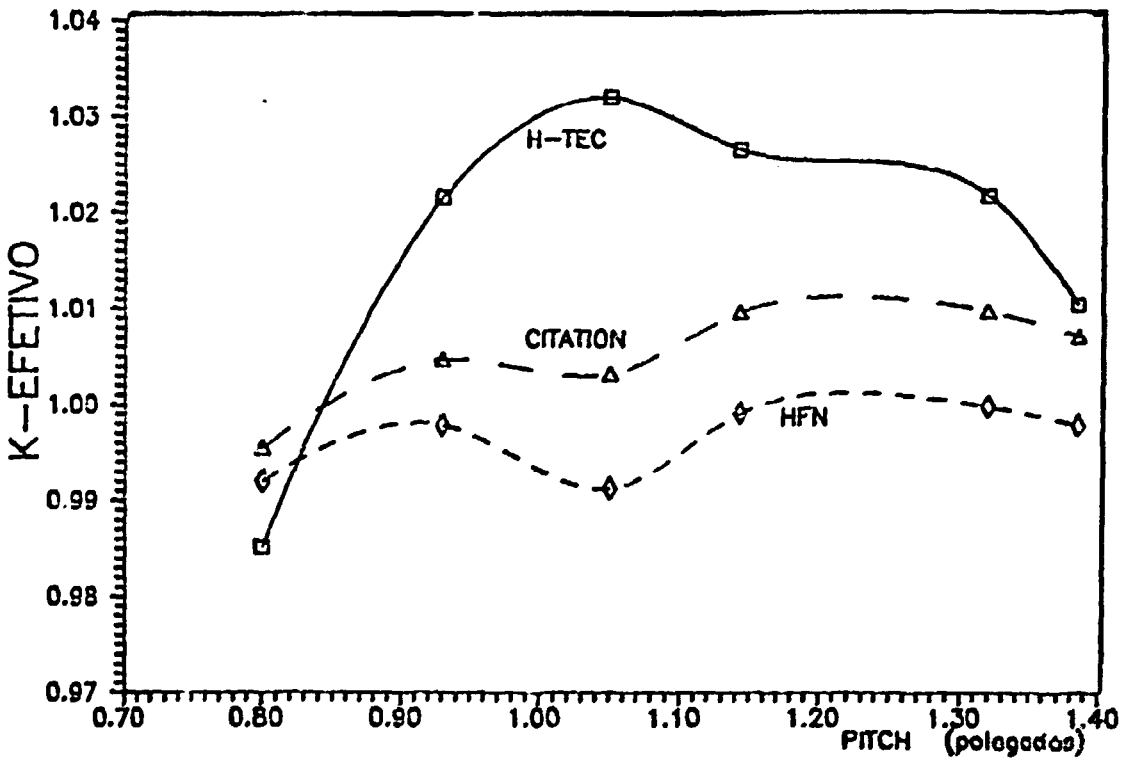


Figura 5.5.1 - K-efetivo X pitch

Celulas de $UO_2-2\%PuO_2$ (EsPu-240)

H-TEC c/ Carvik - cut-off = 0,625 eV

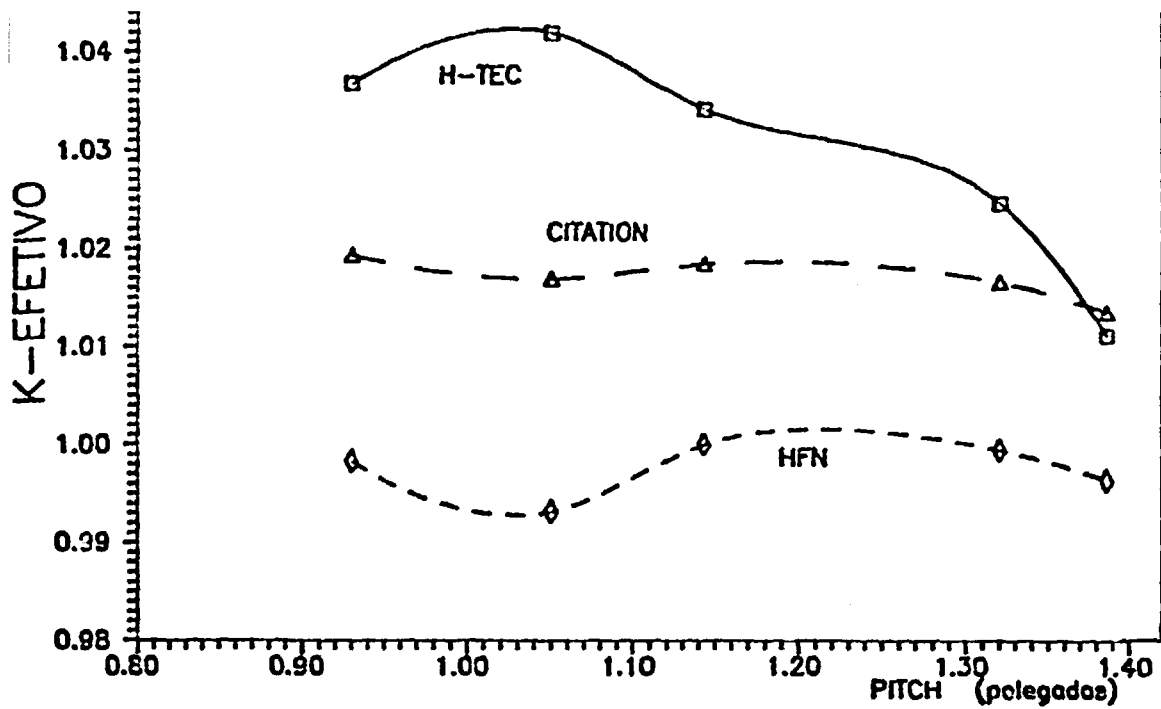


Figura 5.5.2 - K-efetivo X pitch

Celulas de UO₂-2%PuO₂(16%Pu-240)

H-TEC c/ Carvik - cut-off = 0,625 eV

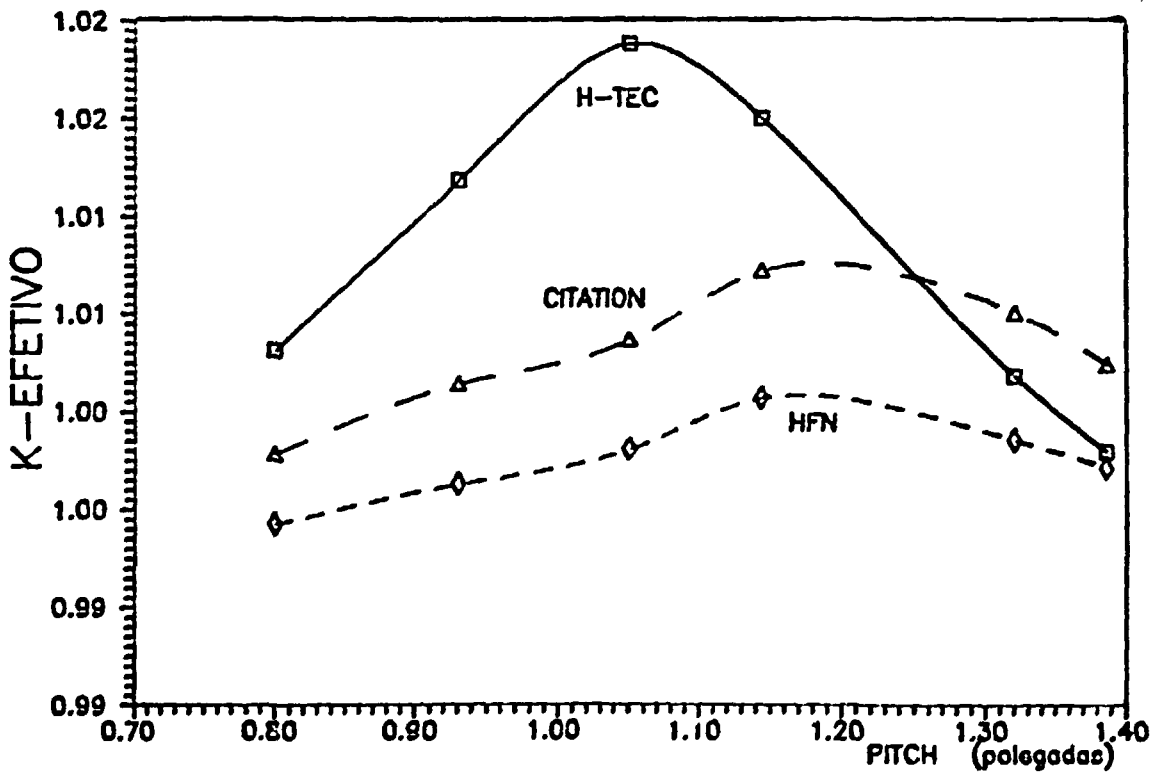


Figura 5.5.3 - K-efetivo X pitch

Celulas de UO₂-2%PuO₂(24%Pu-240)

H-TEC c/ Carvik - cut-off = 0,625 eV

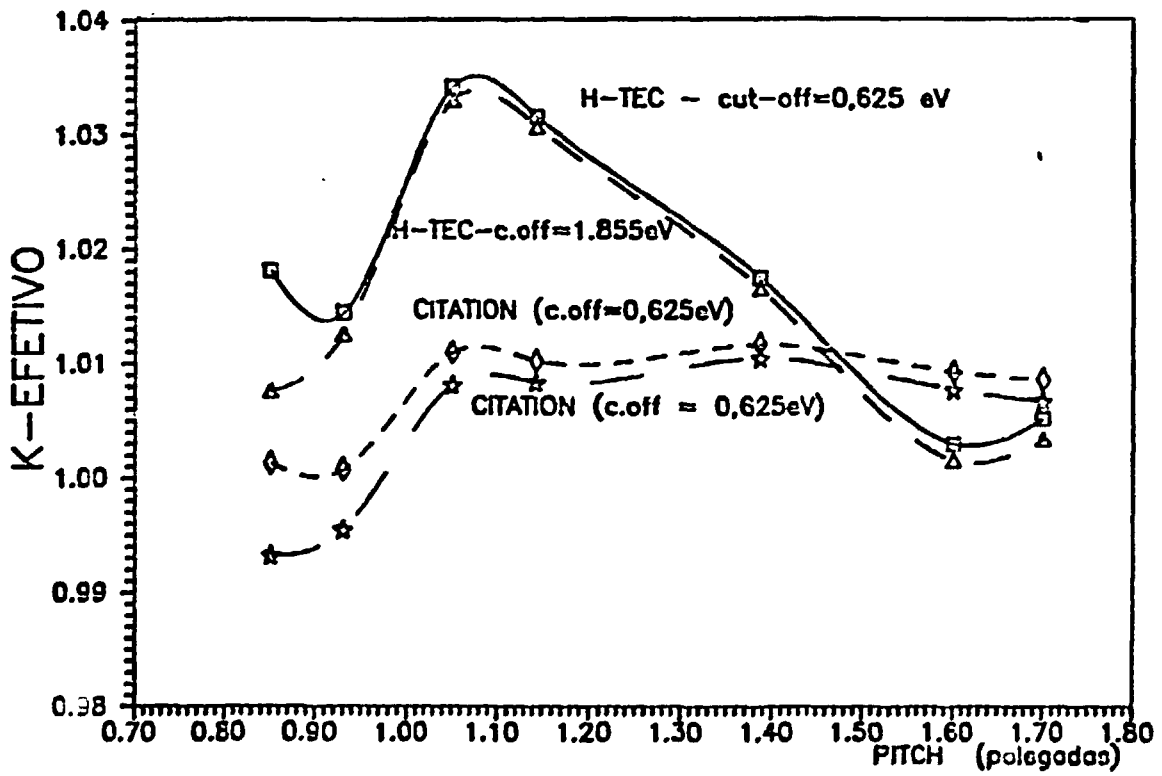


Figura 5.5.4 - K-efetivo X pitch

Celulas de UO₂-4%PuO₂(18%Pu-240)

H-TEC c/ Corvix

5.6 – Resultados obtidos com o programa LASER . –

O programa LASER, brevemente descrito no Apêndice D, possui "cut-off" térmico em 1,855 eV, e cálculo de termalização semelhante ao sistema HAMMER-TECHNION . É o único programa, disponível no IPEN/CNEN-SP, que possui energia de corte térmica igual à da nova versão do sistema HAMMER-TECHNION. A comparação entre os resultados obtidos com estes dois códigos serve como verificação da consistência das implementações realizadas no sistema HAMMER-TECHNION para se alterar sua energia de corte e estrutura de grupos de energia térmica.

Na execução do programa LASER, as composições isotópicas usadas foram as calculadas para as células com 2%PuO₂, conforme Tabela 2.1.1.4, e para as células com 4% e 6.6% de PuO₂ as encontradas nas Tabelas 2.1.2.2 e 2.1.3.2 respectivamente. Os nuclídeos U-234, Pu-238 e Am241 não foram considerados nos cálculos com este programa, pois as bibliotecas térmica e epitérmica do programa LASER disponíveis no IPEN/CNEN-SP não continham estes elementos.

Comparando os resultados obtidos de k_{inf} com a versão do sistema HAMMER-TECHNION que utiliza "cut-off" térmico de 1,855 eV (seção 5.1), com os obtidos com o programa LASER, apresentados nas Tabelas 5.6.1, 5.6.2 e 5.6.3, nota-se grande concordância, principalmente nos casos que apresentam menor razão de moderação, o que mais uma vez faz valer esta nova versão para o código HAMMER-TECHNION para sistemas celulares considerados pouco térmicos .

O programa LASER apresenta duas opções de cálculo da matriz de espalhamento, o

cálculo utilizando o modelo de NELKIN / 60 /, e o utilizando o modelo de gás livre (Wigner-Wilkins), os resultados para o fator de multiplicação de nêutrons, obtidos com ambos os modelos, também podem ser vistos nas Tabelas 5.6.1, 5.6.2 e 5.6.3. Os resultados mostram que para as células unitárias estudadas, os valores de k_{ef} calculados com o modelo de espalhamento de NELKIN aparecem subestimados em relação aos valores calculados com o modelo de gás livre.

Tabela 5.6.1
 k_{ef} e k_{inf} via LASER - Células de $UO_2-2\%PuO_2$

CASO	KERNEL NELKIN		KERNEL GAS LIVRE	
	k_{ef}	k_{inf}	k_{ef}	k_{inf}
CASO	Varetas com 8% de Pu-240			
A1	0,988273	1,34993	0,994736	1,35514
A2	1,020130	1,29192	1,026330	1,39658
A3	1,027480	1,37702	1,033590	1,38186
A4	1,020470	1,34553	1,026680	1,35085
A5	1,014670	1,26049	1,021510	1,26729
A6	1,003520	1,22417	1,010740	1,23158
CASO	Varetas com 16% de Pu-240			
B1	1,026100	1,33793	1,032220	1,34296
B2	1,029540	1,32491	1,035560	1,33001
B3	1,021140	1,29482	1,027260	1,30035
B4	1,011990	1,21242	1,018750	1,21923
B5	0,999154	1,17711	1,006270	1,18447
CASO	Varetas com 24% de Pu-240			
C1	1,009000	1,25444	1,015350	1,26008
C2	1,015190	1,29830	1,021210	1,30337
C3	1,020060	1,26543	1,025940	1,29056
C4	1,015160	1,25570	1,021130	1,26122
C5	1,001550	1,17432	1,008170	1,18103
C6	0,998149	1,13960	1,005150	1,14683

Para as células com 2% de PuO_2 , independentemente da quantidade de Pu-240, a diferença Δk ($\Delta k = (k_1 - k_2)/k_1$ %) onde k_1 é o valor de k_{ef} calculado com o modelo de gás livre e k_2 o valor calculado com o "Kernel" de Nelkin) é em média 0,62%. Para as células com 4% de PuO_2 esta diferença é cerca de 0,81% e para as células com 6,6% de PuO_2 , Δk é da ordem de 0,86% .

Tabela 5.6.2
 k_{ef} e k_{inf} via LASER - Células de UO_2 -4% PuO_2

	KERNEL NELKIN		KERNEL GAS LIVRE	
	k_{ef}	k_{inf}	k_{ef}	k_{inf}
CASO	Varetas com 18% de Pu-240			
D1	1,015130	1,36881	1,023340	1,37678
D2	1,017460	1,40122	1,025690	1,40883
D3	1,035610	1,40985	1,043630	1,41718
D4	1,032170	1,39419	1,040120	1,40163
D5	1,018350	1,30284	1,026990	1,31178
D6	1,006010	1,19397	1,015810	1,20455
D7	1,013490	1,14435	1,020530	1,15161

Tabela 5.6.3
 k_{ef} e k_{inf} via LASER - Células de UO_2 -6,6% PuO_2

	KERNEL NELKIN		KERNEL GAS LIVRE	
	k_{ef}	k_{inf}	k_{ef}	k_{inf}
CASO	Varetas com 8,57% de Pu-240			
E1	0,997371	1,40323	1,006110	1,41201
E2	1,012500	1,45004	1,021510	1,45888
E3	1,010560	1,52520	1,019430	1,53306
E4	1,013850	1,52017	1,022530	1,52782
E5	1,017930	1,41587	1,026670	1,42463

De uma maneira geral, o modelo de espalhamento de NELKIN resulta em valores de k_{ef} mais concordantes com o valor experimental ($k=1,0000$). No entanto, devido ao aspecto da curva de k_{ef} em função da razão de moderação, deve-se esperar que para células muito estreitas ou muito largas o modelo de gás livre seja mais apropriado, pois nesses casos o valor calculado de k_{ef} tende a ser menor que o valor crítico.

CAPÍTULO 6 : RESULTADOS COM AUTOBLINDAGEM VIA ROLAIDS

O efeito da autoblindagem mútua das ressonâncias dos isótopos do plutônio sobre os cálculos de experimentos críticos realizados pelo sistema HAMMER-TECHNION foi estudado executando o módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II com secções de choque pontuais calculadas pelo sistema NJOY.

Duas configurações distintas para a célula unitária cilindrizada foram utilizadas nesse estudo. Na primeira configuração considerou-se a célula unitária consistindo de uma região de combustível, uma de revestimento e outra de moderador. Na segunda configuração / 71 / dividiu-se a região do combustível em dez subregiões de áreas iguais para se obter as secções de choque autoblindadas através do raio do combustível, mantendo uma região para o revestimento e outra para o moderador, totalizando doze regiões para a célula unitária.

As técnicas matemáticas sofisticadas, usadas pelo ROLAIDS, requerem considerável tempo de computação, variando de 80 a 280 minutos para os casos onde a célula unitária foi dividida em 3 e em 12 regiões respectivamente. Por isso apenas algumas células de $UO_2-2\%PuO_2(8\%Pu240)$, identificadas na seção 2.1, foram analisadas com esse procedimento. As concentrações atômicas dos nuclídeos são aquelas fornecidas na Tabela 2.1.1.4.

A biblioteca epitérmica gerada com o módulo ROLAIDS é formatada para utilização no sistema HAMMER-TECHNION em 54 grupos de energia. A biblioteca térmica usada, também processada com o sistema acoplado NJOY/AMPX-II, possui uma estrutura de 30 grupos de energia e energia de corte térmica de 0,625 eV. Em todos os casos analisados, o método B-1 foi utilizado para o tratamento da fuga de nêutrons .

As secções de choque homogeneizadas na célula unitária e colapsadas em 4

macrogrupos de energia, obtidas na execução do sistema HAMMER-TECHNION, agora com o tratamento de autoblindagem das ressonâncias feito pelo ROLAIDS, foram utilizadas para execução do programa CITATION. O modelo do reator considerado foi descrito na seção 5.5, e os dados necessários para a modelagem foram fornecidos na Tabela 2.1.1 .

6.1 CÉLULA UNITÁRIA COM 3 REGIÕES

A Tabela 6.1.1 apresenta os valores de k_{ef} calculados com o sistema HAMMER-TECHNION e com o programa CITATION, quando se considera a primeira configuração da célula unitária. Nesta etapa utilizou-se 5 "meshs-points" para a região do combustível, 1 no revestimento e 10 na região do moderador. Um problema bi-dimensional do tipo R-Z foi calculado com o código CITATION.

Comparando os valores de k_{ef} obtidos com o procedimento descrito acima com os obtidos normalmente, ou seja, sem o módulo ROLAIDS, nota-se que para as células mais estreitas, casos A1 a A4, o tratamento das ressonâncias feito pelo ROLAIDS superestima o valor de k_{ef} em relação aos valores calculados sem este tratamento. A maior diferença, $\Delta K = 0,71\%$, onde $\Delta K = (K_1 - K_2)/K_1$, sendo K_1 o valor calculado com o tratamento via ROLAIDS e K_2 sem este procedimento, aparece para o caso A1 (menor "pitch") e a menor, $\Delta K = 0,06\%$ para o caso A4.

Para células mais moderadas (casos A5 e A6), o valor de K_1 tende a ser menor que o valor de K_2 , sendo a diferença cerca de $-0,163\%$ e $-0,221\%$ para os casos A5 e A6 respectivamente.

Da análise acima, pode-se verificar que o aspecto geral da curva de k_{ef} em função da razão de moderação tende a ser mais plano quando se utiliza o procedimento via módulo ROLAIDS .

Tabela 6.1.1
 k_{ef} obtido após pré-processamento do ROLAIDS

CASO	HAMMER - TECHNION		CITATION
	C/ CARLVIK	S/ CARLVIK	*
A1	0,9923213	0,9898037	0,9986109
A2	1,0263610	1,0233960	1,0059757
A3	1,0344740	1,0319600	1,0031185
A4	1,0273390	1,0251450	1,0084839
A5	1,0202390	1,0185970	1,0068703
A6	1,0082190	1,0067910	1,0037222

* = Valores calculados utilizando secções de choque em poucos grupos obtidas com o sistema H-TEC sem o método de Carlvik .

Resultados obtidos com o código CITATION, anteriormente apresentados na Tabela 5.5.1 e comparados com os da Tabela 6.1.1, mais uma vez mostram que o tratamento via ROLAIDS tende a superestimar o valor de k_{ef} para as células mais estreitas. Para as células mais térmicas, o valor de k_{ef} , obtido com o tratamento da autoblindagem das ressonâncias com o módulo ROLAIDS, são menores que os obtidos sem este procedimento.

As secções de choque em multigrupo, de fissão e captura, obtidas na execução do módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II, para o intervalo de energia de 0,503 a 2,382 eV, foram comparadas com aquelas obtidas na execução do sistema NJOY (diluição infinita). Esta faixa de energia abrange os grupos térmicos 21 a 36 da biblioteca térmica com "cut-off" em 1,855 eV. Desta forma, pode-se avaliar o efeito da auto-blindagem nesta faixa de energia adicionada à biblioteca térmica do sistema HAMMER-TECHNION. Esta análise é ilustrada nas Figuras 6.1.1 a 6.1.3, apenas para os nuclídeos que se destacaram neste tipo de comparação.

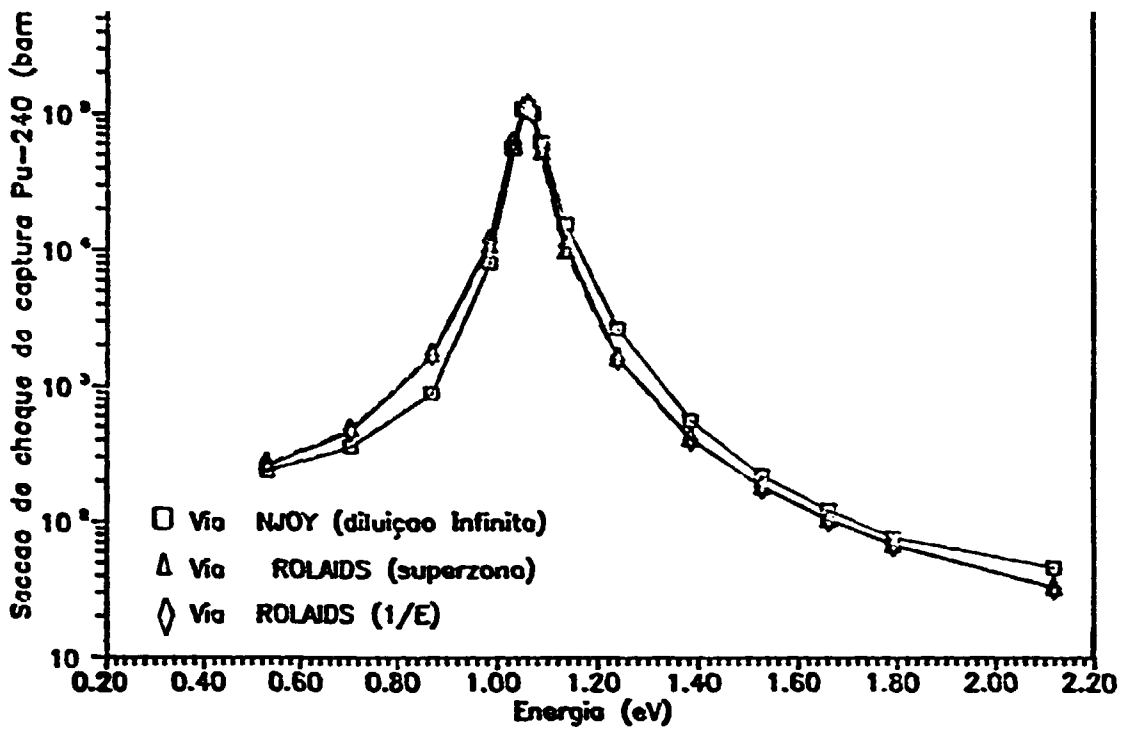


Figura 6.1.1 - Secção de choque de captura do Pu-240 X energia
 Celula de UO₂-2%PuO₂(2%Pu240) - pitch=0,800 polegadas

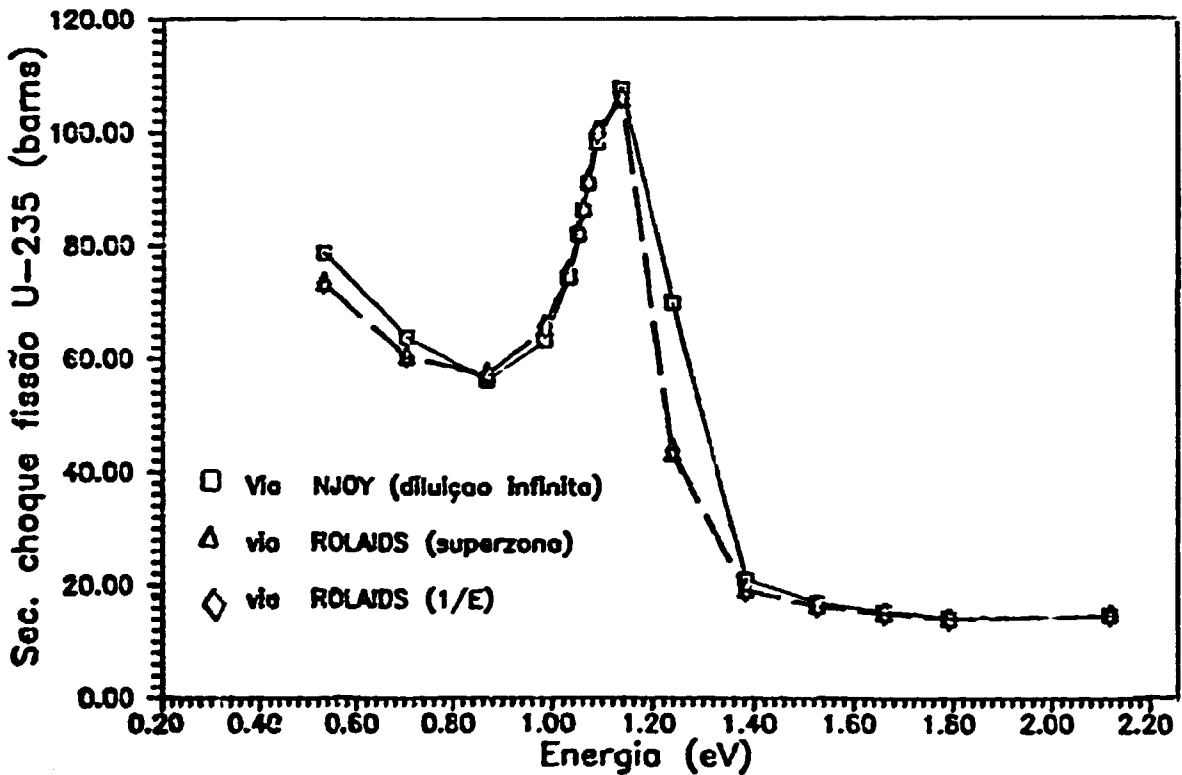


Figura 6.1.2 - Secção de choque de fissão do U-235 X energia
 Celulas de UO₂-2%PuO₂(2%Pu240) - pitch=0,80 polegadas

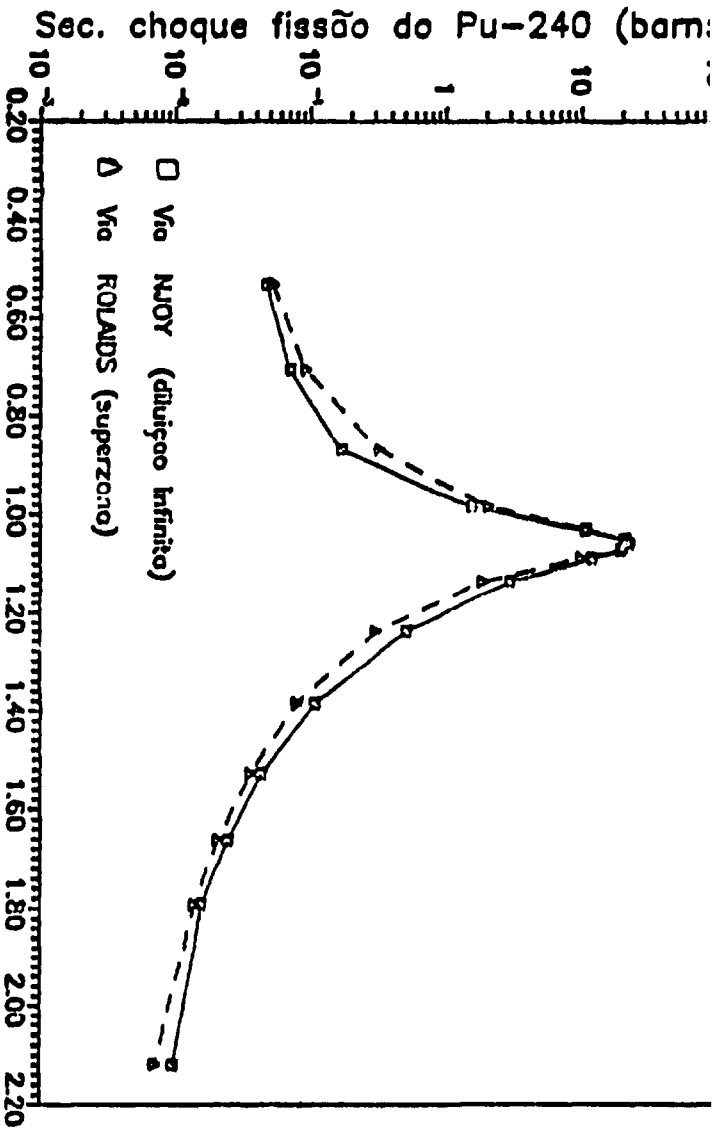


Figura 6.1.3 - Secção de choque de fissão do Pu-240 - pitch = 0,80 polegadas
 Células de UO₂-2%PuO₂(EsPu240) - pitch = 0,80 polegadas

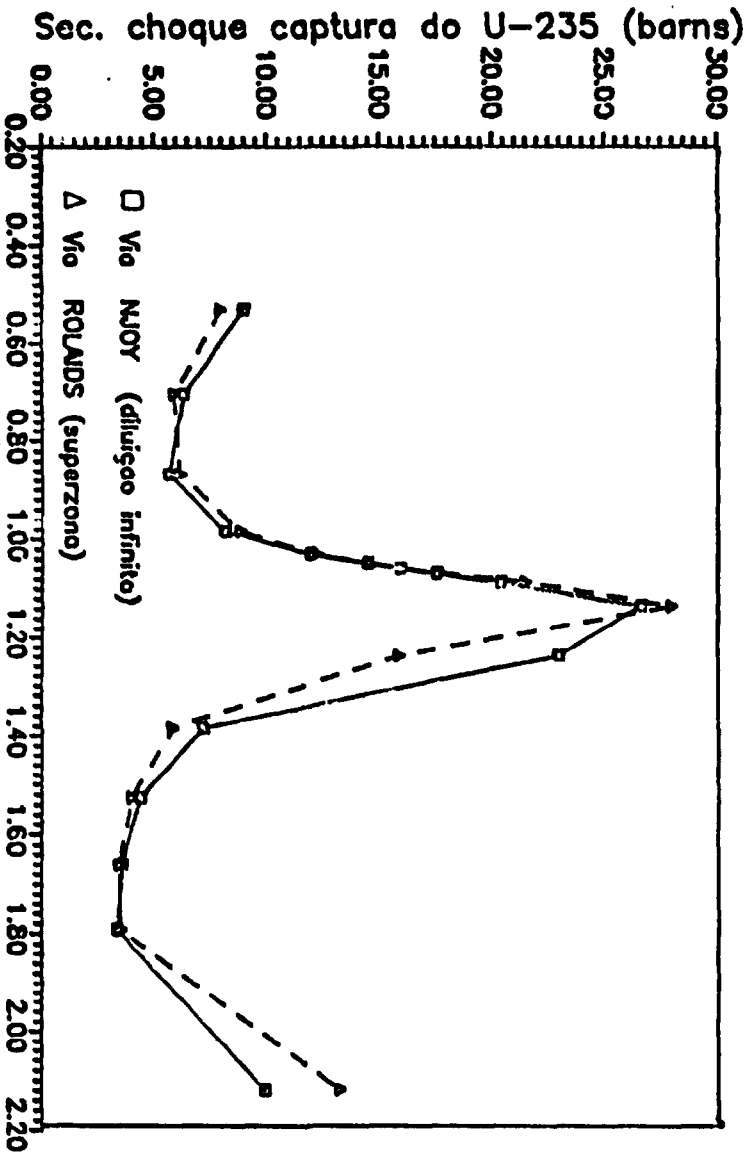


Figura 6.1.4 - Secção de choque de captura do U-235 X energia
 Células de UO₂-2%PuO₂(EsPu240) - pitch = 0,80 polegadas

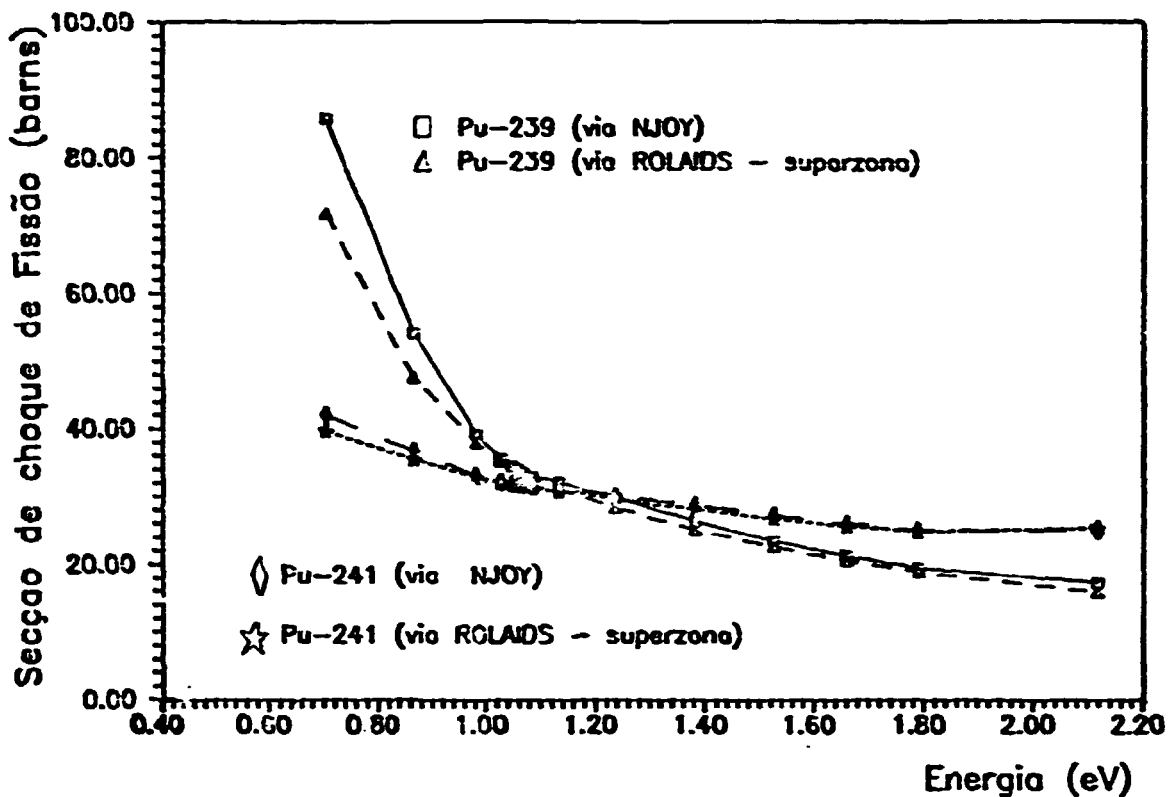


Figura 6.1.5 - Seção de choque de fissão : Pu-239 e Pu-241 X energia
 Cálculos de UO₂-2xPuO₂(2xPu240) - pitch=0,80 polegadas

Na Figura 6.1.1, pode-se verificar a ressonância gigante apresentada próxima à energia de 1,05 eV para o nuclídeo Pu-240, o que eleva a seção de choque de captura de 12000 barns para cerca de 108000 barns, e de 3 para cerca de 22 barns o valor da seção de choque de fissão.

O nuclídeo U-235 apresenta a maior discrepância entre os valores fornecidos via NJOY e os fornecidos via ROLAIDS entre as energias de 1,1 a 1,5 eV. Verifica-se também a presença de uma ressonância em torno de 1,1 eV, a qual aumenta cerca de 3 vezes a seção de choque de captura e cerca de 2 vezes a seção de choque de fissão deste nuclídeo.

Quanto aos demais nuclídeos de interesse neste tipo de análise, nenhuma observação relevante foi verificada.

6.2 – CÉLULA UNITÁRIA COM 12 REGIÕES

Para esta configuração processou-se duas séries distintas de dados nucleares, conforme ilustrado na Tabela 6.2.1. Entretanto não se utilizou o nuclídeo U-238 da biblioteca ENDF/B-IV devido ao fato de que as capturas epitérmicas deste nuclídeo estão superestimadas nesta biblioteca, e conseqüentemente subestima os auto-valores dos experimentos críticos com baixo enriquecimento e moderados a água.

Tabela 6.2.1
Conjuntos de dados nucleares utilizados nesta análise

Nuclídeo	Série A		Série B	
	Ident.	Biblioteca	Ident.	Biblioteca
U-238	2925	JENDL-2	2925	JENDL-2
U-235	1261	ENDF/B-IV	2923	JENDL-2
Pu-239	1264	ENDF/B-IV	2943	JENDL-2
Pu-240	1265	ENDF/B-IV	2944	JENDL-2
Pu-241	1266	ENDF/B-IV	2945	JENDL-2
Pu-242	1161	ENDF/B-IV	2946	JENDL-2
Zirc-2	1284	ENDF/B-IV	1284	ENDF/B-IV
O-16	1276	ENDF/B-IV	1276	ENDF/B-IV
H-1	1269	ENDF/B-IV	1269	ENDF/B-IV

Os cálculos de "slowing-down" do ROLAIDS foram realizados no intervalo de energia de 5,53 keV a 0,625 eV, usando um total de 62915 pontos de energia.

A grandeza fundamental que descreve os efeitos da blindagem devido às ressonâncias sobre as secções de choque efetivas de multigrupo é o fator de autoblindagem, definida como a razão entre a secção de choque de multigrupo autoblindada e seu correspondente

valor à diluição infinita. Este fator de autoblindagem é comumente interpretado como uma medida de quanto a secção de choque de um nuclídeo é reduzida do seu valor à diluição infinita devido à presença de ressonâncias no grupo em consideração .

Todavia, quando há a presença de diferentes nuclídeos com ressonâncias, o efeito de blindagem nas secções de choque de multigrupo de um nuclídeo pode não ser devido somente às suas próprias. Em vez disso, este efeito é o resultado da combinação das várias ressonâncias pertencentes à todos nuclídeos sobre a secção de choque daquele em consideração. Entretanto, é sabido que, dependendo do espectro de nêutrons epitérmicos, a secção de choque de multigrupo de um nuclídeo pode apresentar valores maiores do que seu valor à diluição infinita.

Na Tabela 6.2.2 observa-se os valores dos fatores de auto-blindagem em função da posição dentro da região do combustível, calculados no grupo 44 (8,351 eV – 6,476 eV), para os nuclídeos U-238, U-235 e Pu-239; os respectivos valores das secções de choque calculados à diluição infinita são encontrados na Tabela 6.2.3 . Os valores apresentados referem-se à célula identificada como caso A1; a série A foi a série de dados nucleares considerada na elaboração destas tabelas.

Devido à alta concentração de U-238 e também à sua pronunciada ressonância localizada em 6,67 eV, este nuclídeo domina o espectro de nêutrons neste grupo e, desta forma, sua secção de choque é severamente reduzida em relação ao correspondente valor à diluição infinita. Por outro lado, as secções de choque do U-235 e Pu-239 são afetadas principalmente por esta ressonância, e o efeito final sobre suas secções de choque de multigrupo depende das suas formas e também da forma do espectro de nêutrons calculado pelo ROLAIDS.

O fator de autoblindagem do U-238 varia pouco nas regiões mais internas do combustível; entretanto, aumenta rapidamente a medida que se aproxima da periferia. Basicamente, este comportamento radial do fator de autoblindagem do U-238 é devido à

blindagem espacial, uma vez que próximo ao centro do combustível, o efeito da heterogeneidade, devido ao revestimento e moderador, é menos sentido do que nas regiões mais externas.

Tabela 6.2.2
Valores do fator de auto-blindagem para o grupo 44

região do Combust.	N U C L Í D E O				
	U-238	U-235		Pu-239	
	(n, γ)	(n, γ)	(n, f)	(n, γ)	(n, f)
1	0,02153	0,84636	0,97202	1,13552	1,11966
2	0,02545	0,86715	0,98191	1,14467	1,12871
3	0,02370	0,87800	0,99001	1,15071	1,13476
4	0,02511	0,88854	0,99743	1,15520	1,13934
5	0,02691	0,89908	1,00440	1,15831	1,14260
6	0,02929	0,90971	1,01085	1,15975	1,14430
7	0,03270	0,92043	1,01660	1,15929	1,14422
8	0,03823	0,93118	1,02132	1,15595	1,14146
9	0,05046	0,94164	1,02760	1,14756	1,13396
10	0,14522	0,94777	1,01747	1,12099	1,10954

Tabela 6.2.3
Secções de choque calculadas à
diluição infinita no grupo 44 (barns)

Nuclídeo	$\sigma^{\infty}(n, \gamma)$	$\sigma^{\infty}(n, f)$
U-238	501,3710	-----
U-235	174,6458	141,8717
Pu-239	74,4360	88,3578

O aspecto do comportamento do fator de autoblindagem, discutido acima, também foi observado em vários outros grupos de energia.

Na execução do sistema HAMMER-TECHNION considerou-se 10 "meshs-points"

a região do combustível, isto é, um para cada subregião especificada no ROLAIDS; 1 "mesh-point" na região do revestimento e 5 no moderador.

Na obtenção da biblioteca epitérmica, com o programa HELP, usou-se o espectro de fissão do U-235 e o do Pu-239 consecutivamente. A Tabela 6.2.4 mostra os resultados de K_{inf} obtidos com o sistema HAMMER-TECHNION quando da utilização dos dois espectros de fissão acima.

Tabela 6.2.4
Valores de K_{inf} via ROLAIDS/HAMMER-TECHNION

	Série de dados : A		Série de dados : B	
	Espectro de fissão		Espectro de fissão	
CASO	U-235	Pu-239	U-235	Pu-239
A1	1,34030	1,34359	1,34198	1,34523
A3	1,37970	1,38005	1,38145	1,38309

O uso do espectro de fissão do Pu-239, comparado com o do U-235, além de aumentar a taxa de fissão, dá com conseqüente elevação no valor de K_{inf} , também aumenta a fuga do sistema. O efeito final no fator de multiplicação efetivo dependerá da competição entre as fissões rápidas e a fuga efetiva.

A Tabela 6.2.5 mostra o fator de multiplicação efetivo calculado pelo código CITATION, ilustrando o efeito apontado no parágrafo anterior. Pode-se verificar também que a metodologia de cálculo via HAMMER-TECHNION/CITATION apresenta uma tendência de superestimar o valor de k_{ef} para a célula de "pitch" igual a 1,050 polegadas, considerada a de "pitch" ideal, isto é, o que corresponderá ao valor máximo de K_{inf} para

uma dada vareta combustível e revestimento. Ao mesmo tempo, nota-se uma tendência de subestimar o valor de k_{ef} para as células mais estreitas.

Tabela 6.2.5
Valores de k_{ef} obtidos com o código CITATION

	Série de dados : A		Série de dados : B	
	Espectro de fissão		Espectro de fissão	
CASO	U-235	Pu-239	U-235	Pu-239
A1	0,99555	0,99272	0,99656	0,99353
A3	1,00349	0,99829	1,00453	0,99888

Os valores de k_{ef} , calculados utilizando o espectro de fissão do Pu-239, são sistematicamente menores do que os calculados quando se utiliza o espectro de fissão do U-235. Basicamente, isto é devido ao efeito da fuga, quando da utilização de um espectro de fissão mais "duro". Nos casos estudados nesse trabalho, a fuga é mais importante do que os eventos de fissão rápida, pois as células escolhidas correspondem a sistemas com alta fuga.

O principal nuclídeo físsil é o Pu-239 e os resultados obtidos, nesses experimentos térmicos, mostram que o valor de k_{ef} , calculado quando se utiliza o Pu-239 da JENDL-2, é sempre maior do que quando se utiliza o da ENDF/B-IV.

CAPÍTULO 7: CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Durante o estudo desenvolvido neste trabalho verificou-se que o comportamento dos parâmetros celulares calculados pelo sistema HAMMER-TECHNION, de modo geral, concorda com as previsões teóricas e outros resultados encontrados na literatura. Além disso, notou-se que o tempo de computação total, gasto na execução deste sistema, não apresentou alteração significativa quando se elevou de 30 para 36 o número de grupos de energia na biblioteca térmica.

O efeito da autoblindagem no espectro de nêutrons térmicos, devido à ressonância gigante do nuclídeo Pu-240, na energia de 1,05 eV, é claramente notado na curva do espectro térmico obtida com o novo "cut-off" (1,855 eV). Todavia, a utilização desta nova energia de corte térmica não altera o comportamento do espectro de nêutrons abaixo da energia de 0,625 eV.

Em todas as células estudadas, a curva de k_{ef} calculado, em função da razão de moderação, cresce atingindo um valor máximo, próximo à razão de moderação ótima (k_{inf} máximo), e então decresce conforme se aumenta a moderação da célula.

Os efeitos da interferência entre ressonâncias, analisados no capítulo 6, revelam que o fator de autoblindagem, para sistemas que contenham UO_2 - PuO_2 , pode ser maior que 1,0, indicando a importância das acentuadas ressonâncias dos isótopos do plutônio presentes no combustível. Também no capítulo 6 pode-se verificar que a utilização dos nuclídeos U-235, Pu-239, Pu-240, Pu-241 e Pu-242 da biblioteca JENDL-2 apresenta uma tendência de superestimar o valor de k_{ef} e k_{inf} em relação ao valor calculado quando se utiliza estes nuclídeos da biblioteca ENDF/B-IV.

A nova energia de corte térmica, utilizada neste trabalho, não apresentou efeito extremamente relevante, uma vez que valores de k_{ef} calculados com o novo "cut-off" não apresentam alterações substanciais daqueles calculados com o "cut-off" original. Entretanto, muito trabalho ainda deve ser feito para uma avaliação geral do impacto de incluir as ressonâncias dos isótopos do plutônio na região de energia térmica; nesse sentido, como sugestões para trabalhos futuros, recomenda-se :

1) reanalisar os dados de entrada utilizados ("buckling", "pitch", composição isotópica, etc...), pesquisando, junto à literatura disponível, resultados experimentais referentes aos parâmetros integrais, apresentados na seção 3.3, e comparando-os com os resultados obtidos neste trabalho;

2) utilizar outras bibliotecas de dados nucleares básicos, como a ENDF/B-VI e JENDL-3, que brevemente estarão disponíveis na Divisão de Física de Reatores do IPEN/CNEN-SP;

3) processar a biblioteca térmica para temperaturas maiores que a utilizada neste trabalho, como por exemplo, a faixa de temperatura de operação de um PWR; verificando assim o efeito do "up-scattering", mais acentuado nesta faixa de temperatura;

4) verificar a implicação da utilização de outras estruturas de grupos de energia e "cut-off" térmico ainda mais elevado, e

5) realizar cálculos considerando a queima do combustível, verificando o efeito do "cut-off" térmico sobre as densidades atômicas do plutônio e o coeficiente de reatividade do sistema.

Assim sendo, o estudo desenvolvido neste trabalho, além de apresentar uma nova e eficiente metodologia para a obtenção das bibliotecas básicas do sistema HAMMER-TECHNION, via sistemas NJOY e AMPX-II, serve também como ótima fonte de avaliação dos métodos de cálculo dos sistemas computacionais utilizados, e dos arquivos de dados nucleares básicos ENDF/B-IV e JENDL-2. Desta forma, este trabalho forma um guia completo para análise de experimentos críticos com combustível de UO_2 - PuO_2 .

APÊNDICE A

A.1 – Descrição do Código HAMMER-TECHNION

O código HAMMER executa uma análise celular em multigrupo de energia do nêutron na região térmica e epitérmica, fornecendo secções de choque colapsadas e demais parâmetros da célula unitária homogeneizada para poucos grupos de energia (em geral quatro). A fuga de nêutrons é considerada na teoria de reator assintótico através do "buckling" que é um parâmetro de entrada, o qual pode ser obtido experimentalmente ou analiticamente. Nos casos estudados, considerou-se o "buckling" experimental ao invés do geométrico.

O espectro de nêutrons na região térmica é tratado no programa THERMOS, que resolve a equação integral de transporte para a densidade total de nêutrons em grupo de velocidade assumindo grau de anisotropia de espalhamento de, no máximo 1ª ordem, dada por :

$$N_{ni} = \sum_k T_{nki} Q_{ki} , \quad (\text{A.1.1})$$

onde :

$$Q_{ki} = \frac{1}{V_i} \left[\sum_j P_{kij} N_{kj} + S_{ki} \right] ; \quad (\text{A.1.2})$$

$$T_{nki} = \frac{1}{V_n} \int_{\Delta V_n} d\vec{r} \int_{\Delta V_k} d\vec{r}' \frac{e^{-\left(\sum_s\right)_i s}}{4\pi s^2} ; \quad (\text{A.1.3})$$

$$s = |\vec{r} - \vec{r}'|$$

N_{ni} = densidade neutrônica total por unidade de velocidade na subregião n e grupo de energia i ;

T_{nki} = matriz de transferência : transporte de nêutron de cada subregião k para cada subregião n no grupo de velocidade i ;

S_{ki} = fonte de nêutrons no grupo i na subregião k devido à moderação de nêutrons acima da região térmica;

$P_{kij}N_{kj}$ = fonte de nêutrons no grupo i e na subregião k devido ao espalhamento de nêutrons no grupo j para o momento de Legendre de ordem zero;

$\Delta V_n, \Delta V_k$ = volumes das subregiões n e k , respectivamente; e

Σ = secção de choque total .

A solução da equação (A.1.1) é obtida iterativamente na subrotina ITER para cada grupo de velocidade e em cada subregião da célula unitária. Os elementos da diagonal da matriz P_{kij} são corrigidos pela aproximação de transporte, adotando o mesmo procedimento para a secção de choque total, mantendo assim uma consistência interna entre os dados nucleares necessária para a solução da Equação Integral de Transporte de Nêutrons (EITN).

Obtida a convergência da solução da EITN, procede-se o cálculo da homogeneização e o subsequente colapsamento das secções de choque em poucos grupos. A homogeneização é feita a nível de multigrupo no THERMOS considerando um arranjo celular infinito (sem fuga). O HAMMER-TECHNION faz uso de uma transformada de Fourier para a fuga e utiliza como função ponderação o espectro de nêutrons obtido por meio desse procedimento. Mais comumente, o colapsamento é efetuado em um único grupo de energia cobrindo os grupos de 1 a 29 (aproximadamente 0,00001 eV a 0,6250 eV).

Nas regiões rápida e epitérmica o tratamento do espectro de nêutrons começa com a solução da EITN na célula unitária. A solução da região térmica serve como fonte para a

região rápida. Em seguida se dá a solução concomitante da EITN e o cálculo da autoblindagem das ressonâncias dos núcleos actídeos e, finalmente, o cálculo das secções de choque em poucos grupos. Nestas faixas de energia, a EITN é resolvida para o fluxo escalar de nêutrons ao invés da densidade total de nêutrons. Para uma fonte $Q(\underline{r}')$ isotrópica tem-se:

$$\phi(\underline{r}) = \int \frac{d\underline{r}'}{4\pi s^2} e^{-\bar{\Sigma}_s s} Q(\underline{r}'), \quad (\text{A.1.4}) \quad s = |\underline{r} - \underline{r}'|$$

A fonte $Q(\underline{r})$ contém a contribuição dos nêutrons que são produzidos por fissão no grupo em consideração e pelo "down-scattering" dos nêutrons dos grupos que se situam energeticamente acima do grupo considerado e por consistência inclui-se também o espalhamento "in-group".

A distribuição espacial dos nêutrons de fissão na célula unitária necessária para a solução da EITN na região rápida é calculada na execução do THERMOS.

Para grupos de energia onde os núcleos actídeos apresentam ressonâncias, o HAMMER-TECHNION oferece algumas opções para o cálculo das secções de choque efetivas. Neste trabalho utilizou-se o método de Nordheim uma vez que este é o único disponível no IPEN/CNEN-SP devido às limitações de dados.

Assim dá-se a solução concomitante da EITN e o cálculo da autoblindagem das ressonâncias dos núcleos actídeos, pois as secções de choque efetivas dependem do fluxo escalar de nêutrons obtido através da solução da EITN, o qual, por sua vez, depende das secções de choque efetivas. Esse acoplamento é realizado em duas etapas distintas.

O efeito da autoblindagem das ressonâncias é considerado por meio de frações de absorção nas ressonâncias. Na primeira etapa, essas frações são zeradas para que a

distribuição do fluxo escalar na célula unitária seja obtida na ausência de ressonâncias. Na segunda etapa, utiliza-se esse fluxo no tratamento da autoblindagem das ressonâncias com o método de Nordheim para definir a fração de absorção nas ressonâncias, que será usada para recalculer a distribuição espacial do fluxo escalar nas várias subregiões da célula. Esse procedimento é repetido para todos os grupos nos quais existem núcleos com ressonâncias resolvidas. Todavia, o sistema HAMMER-TECHNION possui também um método opcional para o tratamento da autoblindagem no fluxo devido às ressonâncias não resolvidas.

Após a solução da EITN e o tratamento das ressonâncias resolvidas e não resolvidas em cada grupo, as secções de choque e outros parâmetros relevantes são homogeneizados utilizando a distribuição espacial do fluxo de nêutrons, obtida na segunda iteração, em cada grupo, como função ponderação, para se considerar os efeitos das absorções nas ressonâncias implícitos nos fatores de heterogeneidade inerentes à célula unitária. Assim todos os dados nucleares necessários para o cálculo das secções de choque em poucos grupos estão determinados. Para esse cálculo, usa-se como função ponderação o espectro de nêutrons obtido por meio de uma transformada de Fourier para a fuga num meio homogêneo. Aqui também a fuga e a heterogeneidade são assumidos independentes.

A obtenção das equações finais para o espectro de nêutrons é conseguida no programa MUFT e em seguida procede-se o colapsamento em poucos grupos.

A.2 – Desenvolvimento do THERMOS .

O programa THERMOS, que é um subprograma do sistema HAMMER-TECHNION, é o responsável pelos cálculos realizados na região de energia térmica (energias dos nêutrons até 0,625 eV)

A.2.1 – A Equação Integral de Transporte

Como as secções de choque de absorção de muitos nuclídeos são proporcionais a $1/v$, a taxa de reação $\int v\Sigma_a(v)N(v)dv$ é proporcional à densidade de nêutrons integrada $\int N(v)dv = N$. Deste modo a quantidade de interesse é a densidade escalar de nêutrons $N(\underline{r},v)$. Pode-se definir a densidade de taxa de Nascimento, que dá a distribuição angular de nêutrons após uma colisão, como :

$$H(\underline{r},v,\underline{\Omega}) = \int_0^{\infty} dv' \int d\underline{\Omega}' P(\underline{r},v,v',\mu_0) N(\underline{r},v',\underline{\Omega}) \quad (\text{A.2.1.1})$$

Se o processo de espalhamento e a densidade neutrônica são aproximadamente isotrópicos (isto é razoável devido ao próprio movimento molecular junto às energias térmicas), pode-se escrever a equação acima da forma:

$$H(\underline{r},v) = \int_0^{\infty} dv' P(\underline{r},v,v') N(\underline{r},v') \quad (\text{A.2.1.2})$$

Assim, a equação integral para a densidade de nêutrons fica :

$$vN(\underline{r},v) = \int_{\underline{r}'} d\underline{r}' T(\underline{r},\underline{r}',v) H(\underline{r}',v) , \quad (\text{A.2.1.3})$$

onde T é o fluxo em r devido a uma fonte pontual isotrópica unitária em r' e é dado pela equação (A.1.3).

Divide-se o intervalo de velocidade em uma região rápida ($v > v^*$) e uma região térmica ($v \leq v^*$). O valor de v^* corresponde à energia de 0,625 eV (energia de corte térmica original) acima da qual despreza-se o "upscattering".

A fonte real de nêutrons, a fonte de fissões, é apreciável em torno de 2 MeV. Para a região térmica o termo de fonte representa os nêutrons moderados para a região térmica resultante das colisões que se dão à energias acima de v^* . Este termo de fonte pode ser escrito como:

$$S(\underline{r}, v) = \int_{v^*}^{\infty} dv' P(\underline{r}, v, v') N(\underline{r}, v') \quad (A.2.1.4)$$

E a equação (A.2.1.3) toma a forma :

$$vN(\underline{r}, v) = \int_{\underline{r}'} d\underline{r}' T(\underline{r}, \underline{r}', v) [S'(\underline{r}', v) + \int_0^{v^*} dv' P'(\underline{r}', v, v') N(\underline{r}', v')] \quad (A.2.1.5)$$

onde $S' = S/v$ e $P' = P/v$

O fluxo neutrônico acima de v^* é assumido isotrópico, espacialmente constante e proporcional a $1/v$.

A equação (A.2.1.5) é resolvida numericamente dentro da célula representativa do reator, dividindo os intervalos de velocidade abaixo de v^* em 30 subintervalos e os

intervalos espaciais em NX subintervalos ("meshs") de no máximo 20 . Todas as quantidades são calculadas no ponto médio destes subintervalos, baseando-se no método das probabilidades de colisão .

A.2.2 – O Kernel de Transporte

O cálculo do Kernel de transporte dado pela equação (A.1.3), é realizado de forma exata utilizando a teoria das probabilidades de colisão, o qual requer bastante tempo de computação, como também um grande armazenamento de dados, uma vez que os cálculos são feitos considerando-se um estudo sobre toda a trajetória do nêutron dentro da célula típica.

Outra técnica alternativa para cálculo deste Kernel de transporte é baseada na aproximação de Muller-Linnartz para geometria cilíndrica, dividindo-se a célula típica dentro de regiões homogêneas e calculando-se uma distribuição de corrente nas interfaces. As regiões da célula são então acopladas e o Kernel de transporte, que antes era calculado ponto por ponto, reduz-se agora a cálculos de um conjunto local de probabilidades de escape e transmissão. Estudos realizados para confrontação dos dois métodos de cálculo do Kernel de transporte mostram que, com a opção do método aproximado de Muller-Linnartz, tem-se um ganho real em tempo de computação. Embora este método seja menos exato do ponto de vista teórico, os valores dos parâmetros celulares calculados, com ambos os métodos, como o fator de utilização térmica, possuem grande concordância, sendo que em alguns casos o valor obtido com o método aproximado fica mais próximo do valor experimental do que o valor obtido com o método exato.

A.3 – O Método de Carlvik

Este método consiste em calcular as taxas de transferência de nêutrons de uma subregião para outra da célula unitária cilindrizada, considerando fonte de nêutrons de densidade uniforme .

O número de nêutrons que atingem a subregião k sem sofrer nenhuma colisão na subregião n anterior (raio menor que o da subregião k) é dado por :

$$\Sigma_{ni} \int_0^{\pi/2} \text{sen}\theta d\theta \int_{\alpha_{n-1}}^{\alpha_n} 2\pi r dr \int d\beta e^{-\left[\frac{\tau + \Sigma_{ni} x}{s \text{sen}\theta} \right]}, \quad (\text{A.3.1})$$

onde: Σ_{ni} = densidade da fonte; e

τ = distância em livres caminhos médios entre a n-ésima e a k-ésima superfícies cilíndricas.

Os limites de β são escolhidos de acordo com a direção desejada para os nêutrons.

Trocando $rdrd\beta$ por $\alpha_n \cos\psi_n^0 d\psi_n^0 dx$, tem-se :

$$\begin{aligned} & \Sigma_{ni} \alpha_n \int_0^{\pi/2} \text{sen}\theta d\theta \int 2d\psi_n^0 \cos\psi_n^0 \int dx e^{-\left[\frac{\tau + \Sigma_{ni} x}{s \text{sen}\theta} \right]} = \\ & = \alpha_n \int 2d\psi_n^0 \cos\psi_n^0 \left[K_{i3}(\tau) - K_{i3}(\tau + 2\tau_n) \right], \quad (\text{A.3.2}) \end{aligned}$$

onde: τ_n = metade do comprimento da corda na subregião n, e novamente os limites apropriados são colocados sobre ψ_n^0 .

Inicialmente define-se a quantidade $-S_{nk}$ como o número de nêutrons atingindo um cilindro de raio a_k após um único vôo tendo sido emitido por todas as fontes dentro do cilindro de raio a_n , tal que sua linha de vôo cruze as regiões cilíndricas no sentido crescente do raio. O número de livres caminhos $2\tau_l$ na subregião l da fonte ($1 \leq n$), pode ser especificado em termos dos raios r :

$$r = a_l \operatorname{sen} \psi_l^0, \quad (\text{A.3.3})$$

$$\tau_l = \sum_{li} \sqrt{(a_l)^2 - r^2}, \quad (\text{A.3.4})$$

$$\tau_{l+1} = \sum_{l+1,i} \sqrt{(a_l)^2 - r^2} + \sum_{l+1,i} \left[\sqrt{(a_{l+1})^2 - r^2} - \sqrt{(a_l)^2 - r^2} \right], \quad (\text{A.3.5})$$

$$\tau_k = \sum_{li} \sqrt{(a_l)^2 - r^2} + \dots + \sum_{k,i} \left[\sqrt{(a_k)^2 - r^2} - \sqrt{(a_{k-1})^2 - r^2} \right], \quad (\text{A.3.6})$$

escrevendo : $\epsilon_l = \operatorname{sen}^{-1}((a_{l-1})/a_l)$, obtem-se:

$$\begin{aligned} -s_{nk} &= \sum_{l=1}^n a_l \int_{\epsilon_l}^{\pi/2} 2d\psi_l^0 \cos \psi_l^0 \left[K_{i3}(\tau_k + \tau_l) - K_{i3}(\tau_k - \tau_l) \right] \\ &= \sum_{l=1}^n \int_{a_{l-1}}^{a_l} 2dr \left[K_{i3}(\tau_k + \tau_l) - K_{i3}(\tau_k - \tau_l) \right], \quad (\text{A.3.7}) \end{aligned}$$

Utilizando o método de integração numérica de Gauss-Jacobi, após uma mudança de variável usada para enfatizar comprimentos de corda pequenos, escreve-se :

$$-s_{nk} = \sum_{l=1}^N 2(a_l - a_{l-1}) \sum_{m=1}^N 2W_m \left[K_{13}\{(\tau_k + \tau_l)_{r_n}\} - K_{13}\{(\tau_k - \tau_l)_{r_n}\} \right] , \quad (A.3.8)$$

onde : W_n = pesos na integração de Gauss-Jacobi, e K_{13} = função de Bickley .

A quantidade S_{nk} define a taxa de colisão de único vôo na subregião k devido às fontes uniformemente distribuídas de potencia total $\sum_n \Delta V_n$ na subregião n e pode ser obtida pelos s_{nk} acima . Para um exemplo de duas regiões tem-se :

$S_{11} = \Sigma_1 \Delta V_1 + s_{11} \quad \Rightarrow$ Se $\Sigma_1 \Delta V_1$ nêutrons nascem na região 1, $-s_{11}$ escapam através de sua superfície.

$S_{12} = -s_{11} + s_{12} \quad \Rightarrow$ Se $-s_{11}$ nêutrons nascidos na região 1 entram na região 2 e $-s_{12}$ destes nascidos na região 1 escapam da região 2 sem colisões

$S_{21} = S_{12} \quad \Rightarrow$ Pelo teorema da reciprocidade

$S_{22} = \Sigma_2 \Delta V_2 - (-s_{11} + s_{12}) - (s_{22} + s_{12}) = \Sigma_2 \Delta V_2 - S_{21} - (-s_{22} + s_{12}) \Rightarrow$ Desde que dos $\Sigma_2 \Delta V_2$ nêutrons nascidos na região 2, S_{21} colidem após um único vôo na região 1, e $(-s_{22} + s_{12})$ escapam através da superfície externa da região 2 sem colidirem. (obs: $-s_{22}$ inclui todos os nêutrons nascidos nas regiões 1 e 2 que se movem para fora e escapam, enquanto que $-s_{12}$ inclui apenas aqueles nêutrons nascidos na região 1 que emergem para fora da 2ª região

sem colisão).

O número de nêutrons R_n que atingem a superfície da célula cilindrada de raio a_k é obtido segundo a expressão :

$$R_n = \Sigma_{ni} V_n - \sum_{k=1}^K S_{nk} \quad (A.3.9)$$

A taxa total de colisão da célula será então :

$$R_T = \sum_{n=1}^k R_n \quad (A.3.10)$$

As taxas de colisão acima são então relacionadas com a probabilidade de escape da célula e a probabilidade de um nêutron entrando na célula fazer sua primeira colisão em qualquer subregião desta, considerando as correções devido ao cruzamento pelo contorno. Assim sendo, considerando a região k como a região fonte e a fonte de potência dada por $\Sigma_{ki} \Delta V_{ki}$; a matriz de transporte T_{nki} pode então ser determinada pela expressão :

$$T_{nki} = \frac{(S'_{nk})_{\text{corrigido}}}{\Sigma_{ki}} \quad (A.3.11)$$

onde : $(S'_{nk})_{\text{corrigido}}$ é o fluxo adicional na subregião n após a consideração de cruzamentos, e Σ_{ki} é a densidade da fonte.

O método de Carlvik é mais aprimorado que o método de Honeck que corresponde ao "standard Thermos" usado no código HAMMER-TECHNION. As diferenças básicas

entre estes dois métodos devem-se aos seguintes aspectos :

a) no método de Carlvik a subregião fonte é considerada na integração enquanto que no método de Honeck a fonte de nêutrons na subregião k é assumida concentrada no cilindro central, tal que o processo de integração sobre a região inicial é evitado;

b) o processo de integração resulta no uso das funções Bickley K_{13} as quais são calculadas por uma subrotina mais sofisticada (BIC3) do que as expressões usadas para as funções K_{12} na subrotina GEOR padrão;

c) ambos os métodos consideram uma única célula unitária cilindrizada, porém ao invés de reflexão óptica junto à superfície externa, usado pelo método de Honeck, o método de Carlvik faz uso do teorema da reciprocidade na superfície para fontes isotrópicas uniformes fora da célula unitária anulando toda fuga possível .

A determinação dos elementos da matriz transporte pelo método de Carlvik é realizada na subrotina GEORC que utiliza os calculos executados na subrotina CECPAN

A.4 – Desenvolvimento do HAMLET

O programa HAMLET, utiliza-se da equação integral de transporte para o cálculo da distribuição espacial do fluxo de nêutrons nos 54 grupos de energia. O "Kernel" de transporte é calculado pelo método de Muller-Linnartz. Na região de ressonância, as secções de choque efetivas são calculadas utilizando-se o princípio de equivalência e a correção de Dancoff. O fluxo ($\phi = \phi(E)$) é corrigido durante a moderação dos nêutrons, conforme o programa MUFT, utilizando-se as aproximações P1 ou B1 para resolver a equação de transporte dependente da energia. A seguir, escolhe-se o modelo apropriado : Salengut-Goertzel, Greuling-Goertzel ou Fermi, para representar a variação da densidade de moderação no sistema.

A.4.1 – A Aproximação B1

Escreve-se a equação de transporte unidimensional na forma :

$$\mu \frac{d}{dx} \phi(\mu, u, x) + \Sigma_t(u, x) \phi(\mu, u, x) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-1}^1 d\mu_0 \Sigma_0(\mu_0, u', x) \phi(\mu', u', x) + \frac{\nu}{2} f(u) \int_0^\infty du' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_t(u', x) \phi(\mu', u', x) + \frac{1}{2} \int_0^\infty du' \int_{-1}^1 d\mu' \Sigma_i(u', u, x) \phi(\mu', u', x) \quad (\text{A.4.1.1})$$

Nesta equação assume-se que todas as secções de choque são independentes de x , e define-se a transformada de Fourier de ϕ como:

$$\Psi(\mu, u, B) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(\mu, u, x) e^{iBx} dx \quad (\text{A.4.1.2})$$

Após aplicação da transformada de Fourier à equação (A.4.1.1), e como ϕ tende a zero quando x tende a $\pm \infty$, obtém-se :

$$\left[-\frac{iB\mu}{\Sigma_t(u)} + 1 \right] \Sigma_t(u) \Psi(\mu, u, B) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{-1}^1 d\mu_0 \Sigma_0(\mu_0, u') \Psi(\mu', u', B) + \frac{\nu}{2} f(u) \int_0^\infty du' \Sigma_t(u') \int_{-1}^1 d\mu' \Psi(\mu', u', B) + \frac{1}{2} \int_0^\infty du' \Sigma_i(u', u) \int_{-1}^1 d\mu' \Psi(\mu', u', B) \quad (\text{A.4.1.3})$$

A função Ψ é expandida em série de polinômios de Legendre e introduzida na equação acima, sendo a expressão resultante dividida por $\left[1 - \frac{iB\mu}{\Sigma_t} \right]$, e em seguida multiplicada por $P_k(u)$ e integrada sobre todas as direções Ω , sendo que para a integração do termo que contém a integral de espalhamento usa-se o teorema adicional para os polinômios de Legendre.

Define-se as quantidades :

$$L_i(u) = 2\pi \int_{-1}^1 d\mu_0 \Sigma_0(\mu_0, u') \Psi_i(u', B) P_i(\mu_0) ; \quad (\text{A.4.1.4})$$

$$S(u) = \mathcal{N}(u) \int du' \Sigma_T(u') \Psi_0(u', B) ; \quad (\text{A.4.1.5})$$

$$I(u) = \int du' \Sigma_i(u', u) \Psi_0(u', B) ; \quad (\text{A.4.1.6})$$

e

$$A_{ki}(u) = \int_{-1}^1 \frac{P_k(\mu) P_i(\mu) d\mu}{1 - (i B \mu) / \Sigma_t} . \quad (\text{A.4.1.7})$$

Podemos agora escrever a equação de transporte unidimensional da forma :

$$\Sigma_r(u) \Psi_k(u, B) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{2i+1}{2} A_{ki}(u) L_i(u) + \frac{1}{2} A_{k0}(u) [S(u) + I(u)] \quad (\text{A.4.1.8})$$

A aproximação B1 consiste em reter somente os termos para $i=0$ e $i=1$ da equação (A.4.1.8) e despreza-se todos os termos para os quais $i > 1$.

A.4.2 – A Aproximação P1

Neste método de cálculo, o próprio fluxo de nêutrons $\phi(\mu, u, x)$ é expandido em polinômios de Legendre e a expansão obtida é substituída na equação de transporte unidimensional (A.4.1.1). A expressão resultante é multiplicada por $P_k(\mu)$ e integrada sobre todas as direções Ω , usando para o primeiro termo a relação :

$$\mu P_k(\mu) = \frac{k+1}{2k+1} P_{k+1}(\mu) + \frac{k}{2k+1} P_{k-1}(\mu) . \quad (\text{A.4.2.1})$$

Novamente usa-se o teorema adicional para os polinômios de Legendre e define-se os termos $L_k(u,x)$, $S(u,x)$ e $I(u,x)$ semelhante ao realizado na aproximação B1, e a expressão (A.4.2.1) torna-se :

$$\frac{k+1}{2k+1} \frac{d\phi_{k+1}}{dx} + \frac{k+1}{2k+1} \frac{d\phi_{k-1}}{dx} + \Sigma_r(u)\phi_k(u,k) = L_k(u,x) + \delta_{k0}[S(u,x) + I(u,x)] \quad k = 0,1,2,\dots \quad (\text{A.4.2.2})$$

onde δ_{k0} é o delta de Kronecker.

Obtém-se as equações na aproximação P1, considerando apenas os termos para $k=0$ e $k=1$, desprezando-se o termo ϕ_2 :

$$\frac{d\phi_1}{dx} + \Sigma_r\phi_0 = L_0(u,x) + S(u,x) + I(u,x) \quad (\text{A.4.2.3})$$

e

$$\frac{1}{3} \frac{d\phi_0}{dx} + \Sigma_r\phi_1 = L_1(u,x)$$

Após aplicar a transformada de Fourier nas equações acima obtém-se:

$$\Sigma_r\Psi_0 = L_0 + iB\Psi_1 + S + I \quad (\text{A.4.2.4})$$

e

$$\Sigma_r\Psi_1 = L_1 + \frac{iB}{3}\Psi_0$$

As equações acima são as utilizadas pelo programa MUFT quando a opção de aproximação P1 é escolhida.

A.4.3 – Modelos de Cálculos da Moderação de nêutrons.

A moderação dos nêutrons no sistema HAMMER-TECHNION é descrita pela densidade de moderação $q(\underline{r}, E)$ definida como o número de nêutrons por unidade de tempo e por volume no ponto \underline{r} cuja energia está abaixo de E , e calculada pela expressão :

$$q(u) = \sum_k \int_0^u \Sigma_{sk}(u') \phi(u') du' \int_u^\infty P_k(u', u'') du''$$

$$= \sum_k \int_0^u \Sigma_{sk}(u') \phi(u') K_k(u', u) du' \quad (A.4.3.1)$$

onde : $P_k(u, u')$ é a probabilidade de um nêutron com letargia u passar para o estado de letargia u' após ser espalhado pela k -ésima espécie nuclear, e $K_k(u', u)$ é a fração de nêutrons com letargia u' espalhados pela k -ésima espécie nuclear à letargia maior ou igual a u , e é calculado integrando $P_k(u', u'')$.

Para uma determinada espécie nuclear k escreve-se :

$$q_k(u) = \int_0^u \Sigma_{sk}(u') \phi(u') K_k(u', u) du' \quad (A.4.3.2)$$

onde :

$$K_k(u', u) = \frac{\xi_k}{\gamma_k} e^{-\left(\frac{u-u'}{\gamma_k}\right)} \quad (A.4.3.3)$$

A densidade de moderação $q_k(u)$ deve satisfazer a equação de balanço :

$$\gamma_k \frac{dq_k}{du} + q_k = \xi_k \Sigma_{sk} \phi \quad (A.4.3.4)$$

No modelo de moderação de nêutrons escrito por Fermi, considera-se que a transferência de energia dos nêutrons para os núcleos do meio é feita de modo contínuo. É uma boa aproximação para elementos pesados, uma vez que os nêutrons, ao colidirem com estes, transferem pouca energia, de modo que se pode considerar a moderação como contínua. Neste modelo coloca-se $\gamma_k = 0$ na expressão (A.4.3.4).

Para elementos leves, o nêutron pode ceder grande parte de sua energia numa primeira colisão. Assim, Selengut-Goertzel idealizaram um outro modelo, no qual distingue-se apenas o hidrogênio, sendo os demais núcleos tratados pelo modelo de Fermi. Neste modelo escrito para o hidrogênio tem-se $\gamma = \xi = 1$ quando se considera o espalhamento no sistema Centro de Massa, e a equação (A.4.3.2) fica da forma :

$$q_H(u) = \int_0^u \Sigma_{sH}(u') \phi(u') e^{-(u-u')} du' \quad (A.4.3.5)$$

Nos dois modelos acima, $q(u)$ refere-se à componente isotrópica da densidade de moderação, pois desprezou-se a relação entre a energia perdida pelo nêutron e o ângulo de espalhamento no sistema do laboratório. Um terceiro modelo foi então desenvolvido por Greuling-Goertzel considerando a componente anisotrópica da densidade de moderação $p_k(u)$ para os elementos mais leves como o hidrogênio, deutério e berílio. Neste modelo escreve-se :

$$p_k(u) = \int_0^u \Sigma_{sk}(u') J(u') K_k(u', u) du' \quad (A.4.3.6)$$

onde :

$$K_k(u', u) = \frac{\eta_k}{\rho_k^2} e^{-\frac{(u-u')}{\rho_k}} \quad (A.4.3.7)$$

Aqui, p_k deve satisfazer a equação :

$$p_k = \frac{dp_k}{du} + p_k = \eta_k \Sigma_{\text{ext}} J \quad . \quad (\text{A.4.3.6})$$

A.5 – O Tratamento das Ressonâncias

O tratamento das ressonâncias realizado no programa HAMLET tem como objetivo calcular para cada nuclídeo as frações de fissão e absorção por unidade de densidade de moderação em cada grupo de energia que contenha ressonância. Primeiramente, estas frações são definidas em termos do valor do fluxo neutrônico na ausência de ressonâncias. Uma segunda iteração dos cálculos de transporte integral é realizada onde se determina a depressão do fluxo neutrônico devido a presença de ressonância. Este valor para o fluxo é então usado para se determinar a absorção dentro do grupo correspondente.

Define-se a integral de ressonância efetiva como a integral da taxa de reação na ressonância obtida pelo produto da secção de choque microscópica pelo fluxo neutrônico sobre a ressonância (ou série de ressonâncias) em consideração. A fração de absorção na ressonância será dada então por:

$$\delta_{\alpha} = \frac{N_0 V_0 I_{\text{eff}} \phi_0(u)}{\phi_0(u)} \quad (\text{A.5.1})$$

onde : N_0 = densidade atômica do nuclídeo ressonante;

V_0 = volume da região combustível na célula;

$\phi_0(u)$ = fluxo neutrônico no combustível em unidade de letargia u no alto da ressonância (ou conjunto de ressonâncias) em consideração;

$Q_0(u)$ = densidade de moderação no combustível;

I_{eff} = Integral de ressonância efetiva; e

u = letargia = $\ln (E_1/E)$; E_1 corresponde à energia acima da qual pode-se representar a densidade de colisão pela sua forma assintótica.

Assumindo que a absorção na ressonância seja pequena ($\delta_\alpha \ll 1$), e considerando que, para uma ressonância particular, $\phi_0(u)$ e $Q_0(u)$ possuem a mesma taxa de variação, pode-se escrever:

$$\delta_\alpha = - \frac{d\phi_0(u)}{\phi_0(u)} = - \frac{dQ_0(u)}{Q_0(u)} \quad (A.5.2)$$

e

$$\delta_\alpha = - \frac{N_0}{Q_0} \frac{V_0}{\phi_0} I_{eff} \quad (A.5.3)$$

Nas duas últimas equações, Q_0 refere-se à energia superior do grupo e ϕ_0 é o valor do fluxo na região combustível na ausência de ressonâncias.

A variação na densidade de moderação, ou absorção fracional, na ressonância (ou série de ressonâncias) é definida da forma :

$$\delta_{\alpha'} = 1 - \exp[- \delta_\alpha] \quad (A.5.4)$$

As duas últimas equações são aplicadas para as ressonâncias individuais de um nuclídeo ressonante num determinado grupo de energia. A combinação das frações de absorção nas ressonâncias, calculadas para os diferentes nuclídeos do grupo, é realizada pela multiplicação das frações de não-absorção. Para três nuclídeos quaisquer, escreve-se :

$$\delta_{\beta_1} = \delta_{\alpha'_1} ; \delta_{\beta_2} = \delta_{\alpha'_2}(1-\delta_{\beta_1}) ; \delta_{\beta_3} = \delta_{\alpha'_3}(1-\delta_{\beta_1}-\delta_{\beta_2}) \quad (A.5.5)$$

onde os δ_{β_i} ($i=1,3$) são as frações de absorção aditivas, e devem satisfazer a expressão seguinte :

$$1 - \delta_{\beta_1} - \delta_{\beta_2} - \delta_{\beta_3} = (1 - \delta_{\alpha'_1})(1 - \delta_{\alpha'_2})(1 - \delta_{\alpha'_3}) \quad (A.5.6)$$

O método de Nordheim é baseado numa geometria simplificada de duas regiões, uma região interna (combustível) contendo o absorvedor ressonante, e outra externa que contém o cladding e o moderador. O tratamento integral é realizado para os núclídeos que contém os parâmetros de ressonância $E_0, \Gamma_n, \Gamma_\gamma, \Gamma_f, g_j$, na região de ressonância resolvida, fornecidos pela biblioteca de dados nucleares.

As taxas de absorção na ressonância são determinadas pelas densidades de colisão no combustível $F_0(u)$ (o índice refere-se a região combustível), as quais são calculadas em um intervalo muito pequeno de letargia para se verificar o máximo possível a sua variação através de cada ressonância.

Define-se :

$$F_0(u) = N_0 E \Psi(u) \phi_0(u) \quad (A.5.7)$$

onde : $E = E_0 \exp[-u]$ e E_0 é a energia inicial ;

N_0 = densidade atômica do principal absorvedor ;

$\phi_0(u)$ = fluxo no combustível no pico da ressonância ;

$\Psi_0(u)$ = função blindagem .

Pode-se ver da expressão A.5.7 que $F_0(u)$ é o produto de duas funções dependentes da letargia, que têm o carácter de funções de blindagem, que são influenciadas pela rápida

variação das secções de choque de ressonância. $\phi_0(u)$ decresce suavemente com a absorção na ressonância conforme u aumenta através do grupo.

Colocando $N_0 = 1$ e assumindo o valor do fluxo assintótico na ausência de ressonâncias ($\phi_0=1$), obtém-se a densidade de colisão por unidade de fluxo assintótico para um único átomo absorvedor. Assim sendo, a depressão do fluxo é completamente desprezada, tal que $\phi_0(u)=\phi_0=1$, resultando numa separação entre a blindagem e o cálculo de atenuação do fluxo. Este último pode ser obtido pelo cálculo detalhado de $\Psi(u)$ através do tratamento integral de Nordheim, onde $E\Psi(u)$ tende para a densidade de colisão do combustível por unidade de fluxo para um átomo absorvedor :

$$E \phi^{AS}(u) = \sigma_p + \sigma_1 + \sigma_2 \quad (A.5.8)$$

onde: σ_p = secção de choque de espalhamento potencial do principal absorvedor; e

σ_1 e σ_2 = secções de choque de "background" para dois núclídeos misturados com o absorvedor principal (suas secções de choque macroscópicas de espalhamento divididas por N_0).

A equação integral para $\Psi(u)$ é escrita da forma :

$$V_o \Psi(u) = V_o [1-P_o(u)][T_0\Psi+T_1\Psi+T_2\Psi] + \sum_{n'} \frac{\Sigma_{n'} V_{n'}}{E N_o} P_{on'}(u) dn' \quad (A.5.9)$$

onde os operadores $T_0, T_j(j=1$ ou $2)$, operando sobre $\Psi(u')$ são :

$$T_0 = \frac{1}{1 - \alpha_0} \int_{u-\ln(1/\alpha_0)}^u du' \frac{\sigma_{ao}(u')}{\sigma_t(u')} \quad ; \quad (A.5.10)$$

e

$$T_j = \frac{1}{1 - \alpha_j} \int_{u - \ln(1/\alpha_j)}^u du' \frac{\sigma_{\epsilon j}}{\sigma_t(u')} \quad (\text{A.5.10-i})$$

Aquí define-se: $\alpha_j = \frac{4 A_j}{(A_j + 1)}$, com $A_j =$ massa do j -ésimo isótopo.

A função $P_o(u')$ é a probabilidade de escape total do combustível para todas as subregiões n' fora do mesmo, e $P_{o_n'}$ é a probabilidade de transferência de uma única subregião n' fora do combustível para a região do combustível. Usando o teorema da reciprocidade :

$$\sum_n' \Delta V_n' P_{on'}(u) = N_o \sigma_t(u) V_o P_n'o(u) \quad (\text{A.5.11})$$

leva à equação integral :

$$\Psi(u) = [1 - P_o(u)][T_o\Psi + T_1\Psi + T_2\Psi]_u + P_n'o(u)\sigma_t(u)/E \quad (\text{A.5.12})$$

onde:

$$P_n'o(u) = \sum_{n'} P_n'o(u) dn'$$

A equação acima é resolvida numericamente usando um intervalo de letargia fino. A solução é obtida sobre as regiões centrais das ressonâncias individuais. Acima destas assume-se o valor assintótico de $\Psi(u)$. A integral de ressonância efetiva é calculada por integração numérica pela expressão :

$$I_{eff} = \int \frac{\sigma_a(u)}{\sigma_t(u)} E \Psi(u) du \quad (\text{A.5.13})$$

Nota-se que P_o é função de a/λ , onde a é o raio da região combustível e λ é o livre caminho médio do nêutron dentro desta região. Para sistemas homogêneos tem-se P_o igual a zero. Para células estreitas, onde o espaçamento das varetas combustíveis é bem menor que o livre caminho médio dos nêutrons no moderador, deve-se fazer uma correção onde se leva em conta a interação entre duas varetas vizinhas, isto é, os nêutrons podem passar pelo moderador e sofrer a primeira interação com uma das varetas vizinhas. A este efeito dá-se o nome de "Sombreamento de Dancoff", e define-se a probabilidade de escape corrigida como :

$$P_o^* = \frac{P_o(1 - C)}{1 - C(1 - \bar{r}N_o\sigma_tP_o)} \quad (A.5.14)$$

onde \bar{r} é o comprimento médio da corda na região e C é a correção de Dancoff.

Para resolver a equação (A.5.12), primeiro as probabilidades de colisão são preparadas na subrotina PTBL e PZCALC, em seguida a subrotina NIT, com a ajuda da subrotina GRID, determina os intervalos de letargia a serem usados pelo tratamento integral de Nordheim sobre a região central de uma dada ressonância resolvida. A subrotina RESOL, então, resolve a equação integral (A.5.12), e calcula a integral de ressonância da equação (A.5.13).

APÊNDICE B : Execução do HAMMER-TECHNION . -

A execução dos procedimentos dos cálculos utilizados pelo sistema HAMMER-TECHNION, se dá numa estrutura contínua de subrotinas, divididas em blocos independentes ou rotinas individuais que possuem cada uma, um finalidade específica. As etapas do desenvolvimento dos cálculos, como um todo, são controladas pelo programa principal "MAIN", o qual chama diretamente a subrotina "SELECT", esta por sua vez, separa as demais subrotinas em quatro grandes grupos (LINKs): LINK1, LINK2, LINK6 e LINK12. A Figura B.1 ilustra a sequência de chamada das subrotinas inicializadas pelo programa principal.

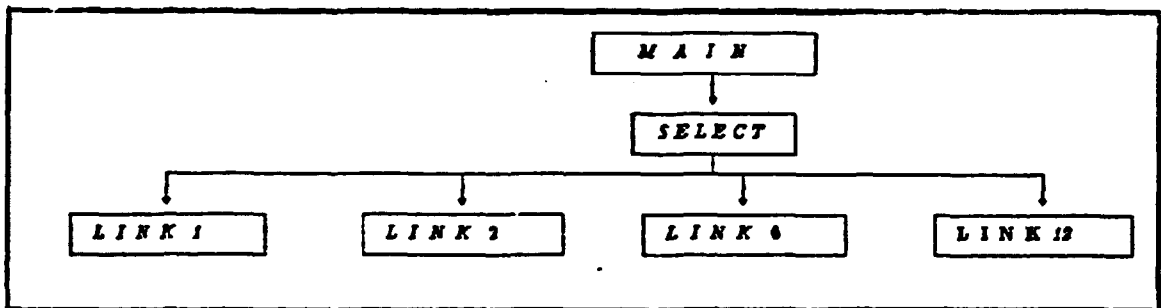


Figura B.1 – Diagrama de blocos das subrotinas que inicializam a execução do H-TEC.

A Figura B.2 ilustra o diagrama de blocos das subrotinas responsáveis pela caracterização da rede de células unitárias. Os dados que definem o arranjo celular são interpretados e checados na rotina LINK1 (programa CAPN). Possíveis erros nestes dados

são apontados na subrotina STOPIT. As instruções sobre a "lattice", dadas nos cartões de entrada, são primeiramente lidas na subrotina INPA, em seguida, esta subrotina chama a subrotina MATC que especifica os núclídeos e misturas constituintes das várias regiões da célula. O número de pontos espaciais ("meshs-points") em cada região é lido na subrotina MESH e a descrição geométrica é completada na subrotina INPB.

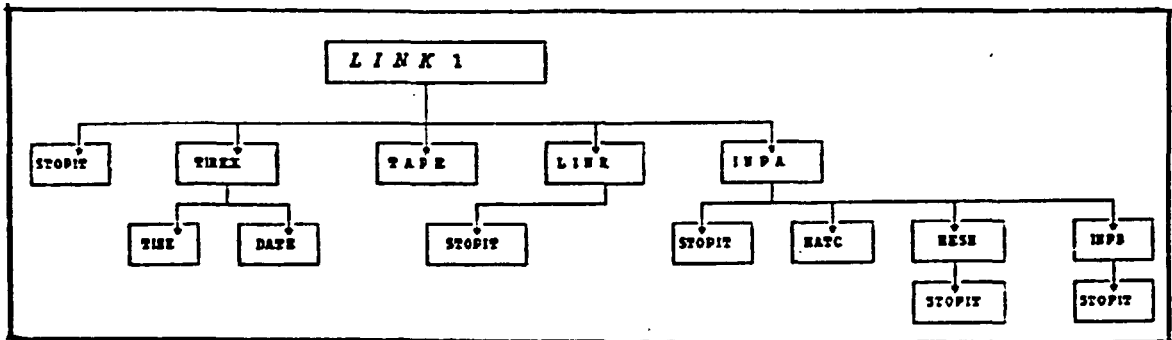


Figura B.2 – Diagrama de blocos das subrotinas que definem o arranjo celular

As subrotinas que tomam parte na análise térmica da célula, são coordenadas e controladas pela rotina LINK2, que após ler os dados fornecidos pelo arquivo que contém a biblioteca térmica comparando os números de identificação e índices de modelo de espalhamento para os vários núclídeos, armazena as secções de choque de fissão e absorção por grupo e isótopo. Esta rotina chama outras subrotinas, sendo cada uma delas responsável por determinado cálculo na região de energia térmica, suas funções estão detalhadas na seção 6 da referência / 82 /. A Figura B.3 esquematiza pela ordem de chamada as subrotinas utilizadas nos cálculos com o programa Thermos.

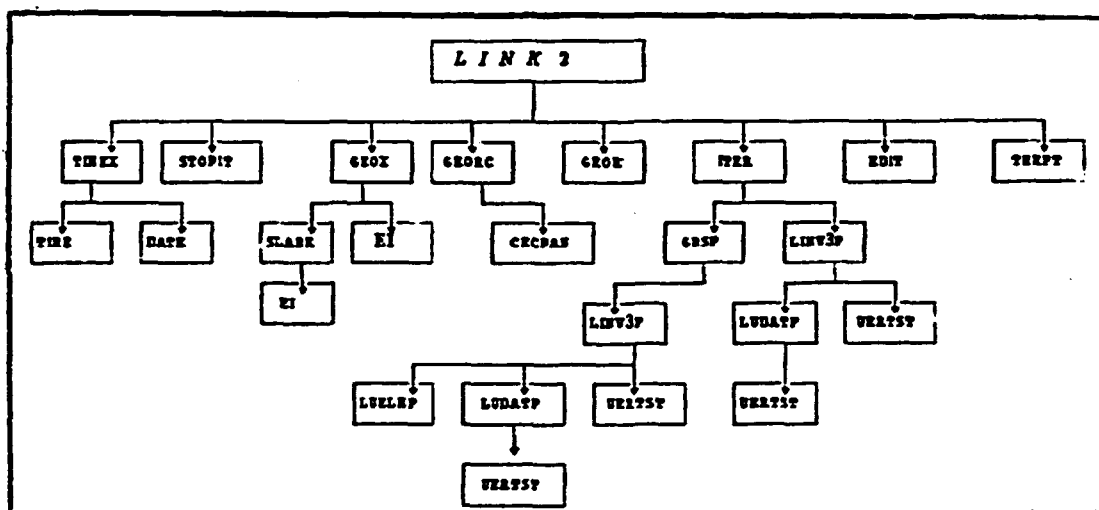


Figura B.3 – Diagrama de blocos das subrotinas utilizadas no programa Thermos

Os cálculos realizados na região de energias epitérmica e rápida, isto é, energias acima do "cut-off térmico, são desenvolvidos pelo programa HAMLET. As subrotinas responsáveis pelo tratamento das ressonâncias, cálculos de moderação e colapso dos 54 multigrupos, bem como todas as outras necessárias nesta faixa de energia, como pode ser visto na Figura B.4, são controladas pela subrotina LINK6.

A subrotina LINK12 controla a edição dos resultados obtidos, a qual é realizada pela subrotina LLED, e determina o final da execução através da subrotina EXIT. A Figura B.5 ilustra a sequência de subrotinas controladas pela LINK12.

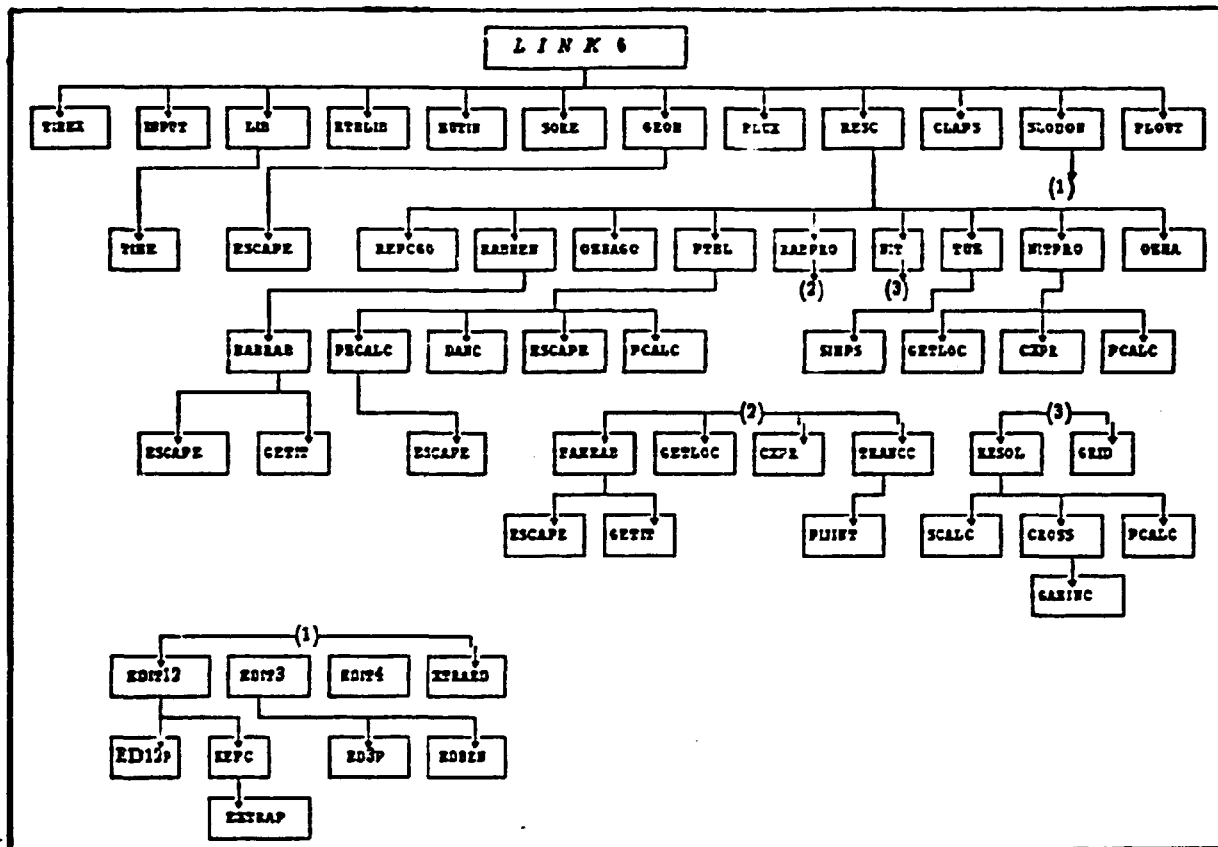


Figura B.4 – Diagrama de blocos das subrotinas utilizadas na região de energias epitérmica e rápida.

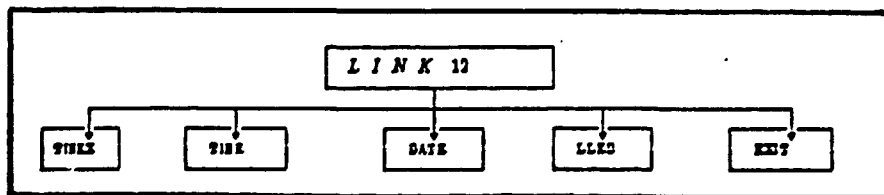


Figura B.5 – Diagrama de blocos das subrotinas que finalizam a execução.

B.1 – Cartões de entrada do H-TEC . –

As instruções para execução do sistema HAMMER-TECHNION são interpretadas por meios de conjuntos de cartões de dados de entrada, que basicamente se diferenciam em : cartões de controle – os quais decidem o tipo de execução e os modelos de cálculo a serem usados na execução; cartões de descrição da célula – estes especificam a geometria e os materiais constituintes da célula; cartões para tratamento das ressonâncias – dependendo do tipo de tratamento das ressonâncias escolhido pelo usuário, estes cartões devem ser adicionados aos anteriores, e devem conter os parâmetros de ressonâncias que descreverão os núcleos ressonantes, a ausência desse tipo de cartão implica no tratamento das ressonâncias pelo método integral de Nordheim, padrão do sistema HAMMER-TECHNION.

Algumas variáveis, que determinam os dados constituintes dos cartões de entrada necessários na execução do sistema HAMMER-TECHNION, consideradas relevantes para os casos estudados neste trabalho, serão brevemente apresentados aqui.

No primeiro cartão (cartão tipo A), que faz parte do conjunto de cartões de controle da célula, a variável NTHRN especifica o método de cálculo do espectro térmico, um valor de NTHRN=2 implica no cálculo com o método de Carlvik, quando esta variável é escolhida com o valor 1 tem-se o cálculo com o "standard Thermos" (método de Honeck). O número de macrogrupos, nos quais os grupos térmicos são colapsados, também pode ser escolhido neste cartão, um valor de INDEX1=0 implica na opção de um único macrogrupo que é o padrão do Thermos. A variável INDEX2 determina a energia de corte térmica usada como limite para correção dos cálculos da integral de ressonância de Nordheim ("wing corrections"), uma escolha de INDEX2=0 implica numa energia de corte de 0,625 eV. O parâmetro de convergência usado na resolução da equação de transporte

realizada na subrotina ITER, é determinado pela variável INDEX4 deste cartão tipo A, o valor desta variável escolhido em todos os casos estudados neste trabalho foi de INDEX4=0 o que implica num parâmetro de convergência de 10^{-4} . Para a colapsoção dos quatro macrogrupos usou-se o espectro do fluxo obtido com o "buckling" de entrada, esta opção é determinada quando se coloca o valor zero para a variável NEPPN. Para o tratamento da moderação no hidrogênio, o usuário possui duas opções distintas: a opção do tratamento pela aproximação P_1 , determinada quando se escolhe valor 1 para a variável NEPSG, e o tratamento pela aproximação de Selengut-Goertzel, quando se usa NEPSG=0, para os outros elementos além do hidrogênio usou-se a "standard age approximation", definida com a opção NEPAG=0, e desconsiderou-se a correção de "upscattering" para o hidrogênio em grupos de energia epitérmica, usando a opção ICADY=0.

Cartões adicionais, tipos A1 e A2, serão utilizados caso as variáveis INDEX1 e INDEX2 sejam escolhidas igual a unidade. Nestes dois cartões especifica-se o número de macrogrupos desejados e a energia de corte para o "wing correction" respectivamente.

O segundo cartão, do conjunto de cartões, comumente usado, é o cartão B. Neste cartão, além de alguns caracteres de controle do sistema computacional, coloca-se o título para identificação do problema rodado.

No cartão tipo 1, correspondente ao terceiro cartão na execução tradicional, identifica-se a célula e define-se, pela variável ITHMAX, o número máximo de iterações no Thermos, que normalmente é de 150 iterações, escolhido quando esta variável assume o valor zero.

No cartão seguinte, o cartão tipo 2, são determinadas as características da célula. A variável NGEOM define o tipo de geometria do arranjo celular, que pode ser tipo placa, hexagonal ou quadrada (NGEOM=1, 2 e 3 respectivamente). O número de regiões na célula é determinado pela variável NRX (na versão original o número máximo de regiões para cada célula é de 20 regiões), nos casos estudados neste trabalho considerou-se 3 regiões

distintas: combustível, revestimento e moderador. A cada região está associado um número de misturas definido pela variável MX, a versão original do sistema HAMMER-TECHNION permite um número máximo de 10 misturas para cada região, todavia, foi fruto deste trabalho a elevação deste número para 20. O método usado para cálculo de fuga pode ser através da aproximação P1 ou B1, a variável que seleciona esta opção é a NP1B1. O sistema HAMMER-TECHNION também oferece ao usuário a opção de um região externa à célula modelada, com a função de um alto espalhador ("scattering ring"), a qual tenta reduzir a fuga de nêutrons da célula, a escolha NBCT=0 despreza esta região espalhadora. O valor do "buckling" medido para a célula é colocado em unidade de m^{-2} através da variável BSQD.

Os cartões seguintes especificam as regiões celulares bem como cada nuclídeo pertencente a cada uma destas regiões. No primeiro cartão de uma dada região, a variável NR denota o número sequencial da região, considerando como a primeira aquela região central da célula; a variável MXAS especifica o número da mistura associada com esta região, caso haja mais de uma mistura associada com uma mesma região; um valor de MXAS=1 corresponde à mistura no centro da região. A variável NPT determina o número de intervalos espaciais ("meshs-points") associados com cada região. Para regiões espalhadoras, como a água leve, é interessante no cálculo do espectro térmico considerar o "upscattering", o que é desnecessário para uma região altamente absorvedora como o combustível; a variável que estipula esta opção é a ILHI, o "up-scattering" é ignorado escolhendo-se ILHI=0, ou considerado quando ILHI=1. O diâmetro externo da região, ou espessura quando a geometria é do tipo placa, e o "pitch", em unidade de polegadas, são especificados pela variável THT. A temperatura associada a cada região é descrita pela variável DEGC em graus Celsius.

Os dados referentes a cada nuclídeo existente em uma dada região, devem constituir de um cartão adicional independente. Neste cartão, a variável WSTBA dá o número de

identificação ID do nuclídeo na região. O modelo de espalhamento utilizado nos cálculos do Thermos é especificado pela variável WSTBB, com o valor 1030. para todos os nuclídeos processados neste trabalho via sistema acoplado NJOY - AMPX-II. A concentração atômica em unidade de átomos por barn-cm do nuclídeo é especificada pela variável CONCTA.

A partir do cartão de identificação da célula, cartão do tipo 1 acima, todos os cartões de entrada devem ser numerados em ordem crescente, isto é feito especificando o valor da variável NC na coluna 4 de cada cartão, no último cartão, que corresponderá ao último nuclídeo da última região, deve-se colocar o valor 1 na primeira coluna.

Após o cartão dito no parágrafo acima, deve-se determinar os limites de energia para colapso dos 54 grupos epitérmicos. O que normalmente se faz é colocar os valores 25 entre as colunas 21 a 25 deste cartão, o valor 10 entre as colunas 26 a 30 e o número 25 entre as colunas 31 a 35. O primeiro valor 25 indica que o primeiro macrogrupo, na colapso de todos os 54 multigrupos em apenas dois macrogrupos, corresponderá aos multigrupos de 1 a 25 (10 MeV a 5,53 keV), o segundo macrogrupo corresponderá aos multigrupos de 26 a 54 (5,53 keV a 0,625 eV). O segundo valor deste cartão, número 10, diz que o primeiro macrogrupo, agora numa colapso em três macrogrupos, corresponderá aos multigrupos de 1 a 10 (10 MeV a 0,83 MeV), o segundo macrogrupo terá seu limite de energia ("break point") determinado pela terceira quantidade encontrada neste cartão, normalmente o valor 25, correspondendo então aos multigrupos de 11 a 25 (0,83 MeV a 5,53 keV). O terceiro macrogrupo é obtido da colapso dos grupos 26 a 54 restantes na biblioteca epitérmica.

A escolha destes "break point", discutidos acima, determina os limites das integrais dos cálculos realizados na região de energias epitérmicas e rápidas, o que influencia nos valores obtidos dos parâmetros celulares homogeneizados e colapsados, os quais são utilizados no cálculo com o programa CITATION. Neste trabalho, estudou-se o

comportamento destes parâmetros quando se altera os valores destes "break point", isto foi feito para as células correspondentes aos casos A1 e A3, os resultados são mostrados na Tabela B.1.1.

Tabela B.1.1
Parâmetros Celulares Homogeneizados e Colapsados em 4 grupos

CASOA1	COEFICIENTE DE DIFUSÃO		SECÇÃO CHOQUE ABSORÇÃO	
GRUPO	BP= 25-10-25	BP= 50-25-50	BP= 25-10-25	BP= 50-25-50
1 → 4	1,88598E+00	1,37709E+00	4,06817E-03	3,13929E-03
2 → 4	9,81439E-01	6,64950E-01	2,41708E-03	2,49011E-02
3 → 4	6,66096E-01	6,77411E-01	2,76001E-02	5,42444E-02
4 → 4	2,54958E-01	2,54958E-01	1,56886E-01	1,56886E-01
	ν-SECÇÃO CHOQUE FISSÃO		SECÇÃO CHOQUE REPOÇÃO	
1 → 4	9,73093E-03	4,77920E-03	8,16504E-02	4,47944E-02
2 → 4	9,29239E-04	1,21948E-02	7,96220E-02	8,23339E-02
3 → 4	1,29721E-02	2,06455E-02	6,91875E-02	7,52193E-01
4 → 4	2,62293E-01	2,62293E-01	0,0 E+00	0,0E+00
CASOA3	COEFICIENTE DE DIFUSÃO		SECÇÃO CHOQUE ABSORÇÃO	
GRUPO	BP= 25-10-25	BP= 50-25-50	BP= 25-10-25	BP= 50-25-50
1 → 4	1,87626E+00	1,41646E+00	2,76701E-03	2,07031E-03
2 → 4	1,00366E+00	6,34246E-01	1,44482E-03	1,53639E-02
3 → 4	6,33709E-01	6,29078E-01	1,72256E-02	3,32873E-02
4 → 4	1,95849E-01	1,95849E-01	9,15165E-02	9,15165E-02
	ν-SECÇÃO CHOQUE FISSÃO		SECÇÃO CHOQUE REPOÇÃO	
1 → 4	6,30906E-03	3,28235E-03	9,19953E-02	5,59821E-02
2 → 4	5,65029E-04	7,23769E-03	1,06242E-01	1,18710E-01
3 → 4	7,71274E-03	1,18113E-02	1,02260E-01	9,84516E-01
4 → 4	1,39913E-01	1,39913E-01	0,0E+00	0,0E+00

Na Tabela B.1.1, BP significa "break point", BP=25-10-25 dá a combinação

padrão dos grupos MUFT cujas energias limites foram apresentadas acima. A escolha de BP=50-25-50 faz com que, na colaptação dos 54 multigrupos em 3 macrogrupos, o primeiro macrogrupo aborde os grupos MUFT de 1 a 25 (10 MeV a 5,53 keV), o segundo macrogrupo cobrirá os grupos de 26 a 50, o que corresponde às energias de 5,53 keV a 1,855 eV, ficando o terceiro macrogrupo com os grupos 51 a 54 (1,855 a 0,625 eV). Com esta escolha para os "break points", pode-se verificar a consistência entre os resultados obtidos com o sistema HAMMER-TECHNION original, e aqueles obtidos quando se alterou a energia de colaptação de 0,625 eV a 1,855 eV.

Na Tabela B.1.2, compara-se os resultados obtidos com a versão que possui colaptação na energia de 1,855 eV e estrutura de 36 grupos térmicos, com os obtidos com a versão original, "cut-off" térmico em 0,625 eV e estrutura de 30 grupos térmicos, utilizando BP = 50-25-50, isto é, fazendo a colaptação do terceiro macrogrupo em 1,855 eV.

Tabela B.1.2
 Parametros Celulares Homogeneizados e Colapsados em 4 grupos

GRUPO	COEFICIENTE DE DIFUSÃO		SECÇÃO CHOQUE ABSORÇÃO	
	cut-off orig	novo cut-off	cut-off orig	novo cut-off
1 → 4	1,40940E+00	1,85591E+00	2,11091E-03	2,89738E-03
2 → 4	6,44523E-01	1,00836E+00	1,49159E-02	1,40447E-03
3 → 4	5,41208E-01	6,44523E-01	3,10365E-02	1,49158E-02
4 → 4	1,95457E-01	2,13982E-01	9,01135E-02	8,51207E-02
	ν-SECÇÃO CHOQUE FISSÃO		SECÇÃO CHOQUE REMOÇÃO	
1 → 4	3,13065E-03	5,98918E-03	5,55710E-02	9,13540E-02
2 → 4	7,35220E-03	5,63133E-04	1,16472E-01	1,05462E-01
3 → 4	1,27421E-02	7,35220E-03	8,44793E-01	1,16472E-01
4 → 4	1,37362E-01	1,26403E-01	0,0E+00	0,0E+00

Os resultados apresentados na Tabela B.1.2 referem-se ao Caso A3. Neste caso usou-se o método de cálculo "standard Thermos", considerando "up-scattering" para as três regiões celulares. Na distribuição dos intervalos espaciais nas regiões celulares, considerou-se 5 "mesh-points" para a região combustível, 1 para o revestimento e 10 para o moderador. As colunas correspondentes ao "cut-off" original referem-se à execução do HAMMER-TECHNION original colocando os "break points" em 50-25-50; as colunas correspondentes ao novo "cut-off" referem-se à execução da nova versão, a qual utiliza "cut-off" térmico de 1,855 eV, nessa nova versão, os "break points" foram considerados os tradicionais 25-10-25.

Verifica-se na Tabela B.1.2, que os valores dos parâmetros apresentados para o segundo macrogrupo, obtidos com o "cut-off" original e "break points" em 50-25-50, são exatamente iguais aos apresentados para o terceiro macrogrupo obtidos com o novo "cut-off" e "break points" em 25-10-25. Isto demonstra uma perfeita consistência nas alterações, realizadas neste trabalho, na região de energia epitérmica, quando da alteração do "cut-off" térmico.

Após o cartão que determina os limites de energia de colapso dos grupos epitérmicos, apresentado nos parágrafos anteriores, insere-se um cartão com os identificadores do nuclídeo fértil (U-238) e físsil (U-235), para os quais serão calculadas as taxas de reação em quatro macrogrupos.

Em seguida, o usuário determina o número de regiões homogeneizadas (super-região) desejada, em geral considera-se uma homogeneização independente para cada região da célula, e uma super região que corresponderá a homogeneização de todas as regiões da célula, e que portanto possuirá uma fração de volume igual a unidade.

O conjunto de cartões apresentado nos parágrafos acima completam os dados de entrada necessários para a execução do código HAMMER-TECHNION na sua forma mais tradicional, entretanto, subrotinas para realização de cálculos de queima foram implementadas, obrigando a necessidade da inclusão de cartões denominados cartões de "burnup", os quais devem conter os dados necessários para o processamento destas subrotinas, tais como o número de "time-steps" desejados e a potência do reator considerado.

Os dados constantes das bibliotecas térmica e epitérmica são lidos em arquivos separados denominados tape 18 e tape 19 respectivamente, os quais são solicitados pelo sistema durante sua execução.

APÊNDICE C

As estruturas de grupos de energias, necessárias na elaboração das bibliotecas de dados nucleares, utilizadas na execução do sistema HAMMER-TECHNION, são aqui apresentadas.

A Tabela C.1 mostra o valor das energias limites dos grupos considerados térmicos, e que são utilizados nos cálculos realizados com o programa THERMOS, para as duas bibliotecas térmicas processadas: a que possui "cut-off" original (0,625 eV) e a que possui o "cut-off" novo (1,855 eV), implementado neste trabalho.

Para a faixa de energia acima da faixa térmica, cujo tratamento é feito pelo programa MUFT, a estrutura de grupos de energia utilizada foi a original do sistema HAMMER-TECHNION, cujas energias limites são apresentadas na Tabela C.2 .

Tabela C.1
Estruturas de grupos para a faixa de energia térmica

	"CUT-OFF" = 0,625 eV		"CUT-OFF" = 1,855 eV	
GRUPO	LIMITES DE ENERGIA (eV)		LIMITES DE ENERGIA (eV)	
	inferior	superior	inferior	superior
1	6,3300E-05	5,6930E-04	2,5300E-04	2,2770E-03
2	5,6930E-04	1,5813E-03	2,2770E-03	6,3250E-03
3	1,5813E-03	3,0993E-03	6,3250E-03	1,2397E-02
4	3,0993E-03	5,1233E-03	1,2397E-02	2,0493E-02
5	5,1233E-03	7,6533E-03	2,0493E-02	3,0613E-02
6	7,6533E-03	1,0689E-02	3,0613E-02	4,2757E-02
7	1,0689E-02	1,4231E-02	4,2757E-02	5,6925E-02
8	1,4231E-02	1,8279E-02	5,6925E-02	8,1972E-02
9	1,8279E-02	2,2833E-02	8,1972E-02	1,1159E-01
10	2,2833E-02	2,7893E-02	1,1159E-01	1,4573E-01
11	2,7893E-02	3,3459E-02	1,4573E-01	1,8444E-01
12	3,3459E-02	3,9531E-02	1,8444E-01	2,2770E-01
13	3,9531E-02	4,6109E-02	2,2770E-01	2,5104E-01
14	4,6109E-02	5,3193E-02	2,5104E-01	2,7053E-01
15	5,3193E-02	6,0783E-02	2,7053E-01	2,9075E-01
16	6,0783E-02	6,9717E-02	2,9075E-01	3,0113E-01
17	6,9717E-02	8,0161E-02	3,0113E-01	3,2064E-01
18	8,0161E-02	9,2297E-02	3,2064E-01	3,5768E-01
19	9,2297E-02	1,0632E-01	3,5768E-01	4,1704E-01
20	1,0632E-01	1,2190E-01	4,1704E-01	5,0326E-01
21	1,2190E-01	1,4091E-01	5,0326E-01	6,2493E-01
22	1,4091E-01	1,6451E-01	6,2493E-01	7,8211E-01
23	1,6451E-01	1,9412E-01	7,8211E-01	9,5070E-01
24	1,9412E-01	2,3151E-01	9,5070E-01	1,0137E+00
25	2,3151E-01	2,7887E-01	1,0137E+00	1,0428E+00
26	2,7887E-01	3,3891E-01	1,0428E+00	1,0525E+00
27	3,3891E-01	4,1498E-01	1,0525E+00	1,0624E+00
28	4,1498E-01	5,1119E-01	1,0624E+00	1,0722E+00
29	5,1119E-01	6,2481E-01	1,0722E+00	1,0987E+00
30	6,2481E-01	7,8493E-01	1,0987E+00	1,1664E+00
31			1,1664E+00	1,3079E+00
32			1,3079E+00	1,4575E+00
33			1,4575E+00	1,5950E+00
34			1,5950E+00	1,7262E+00
35			1,7262E+00	1,8550E+00
36			1,8550E+00	2,0000E+00

Tabela C.2
Estrutura de grupos para a faixa de energia não térmica

GRUPO	Energia(eV)	GRUPO	Energia(eV)
1	5,1119E-01	29	2,0350E+03
2	6,2500E-01	30	3,3550E+03
3	8,3400E-01	31	5,5310E+03
4	1,1250E+00	32	9,1100E+03
5	1,4390E+00	33	1,5030E+04
6	1,8550E+00	34	2,4790E+04
7	2,3820E+00	35	4,0870E+04
8	3,0590E+00	36	6,7360E+04
9	3,9280E+00	37	8,6520E+04
10	5,0430E+00	38	1,1110E+05
11	6,4760E+00	39	1,4260E+05
12	8,3150E+00	40	1,8320E+05
13	1,0680E+01	41	2,3520E+05
14	1,3710E+01	42	3,0200E+05
15	1,7600E+01	43	3,8770E+05
16	2,2600E+01	44	4,9790E+05
17	2,9020E+01	45	6,3930E+05
18	3,7270E+01	46	8,2060E+05
19	4,7850E+01	47	1,0540E+06
20	6,1440E+01	48	1,3530E+06
21	7,8890E+01	49	1,7380E+06
22	1,0130E+02	50	2,2310E+06
23	1,3000E+02	51	2,8650E+06
24	1,6700E+02	52	3,6790E+06
25	2,7540E+02	53	4,7200E+06
26	4,5400E+02	54	6,0650E+06
27	7,4850E+02	55	7,7880E+06
28	1,2340E+03		

APÊNDICE D – Metodologia de Cálculo do LASER

O código LASER foi desenvolvido para executar um cálculo celular unidimensional, cilíndrico, numa estrutura de 85 grupos de energia. O "cut-off" térmico está situado na energia de 1,855 eV. O código leva em conta os efeitos não lineares nas equações de "burnup" e calcula explicitamente a distribuição espacial da queima dentro das varetas combustíveis.

Este código é baseado nas versões do "slowing-down" do programa MUFT e na teoria de transporte de termalização do programa THERMOS.

No intervalo de energia de 1,855 eV a 10 MeV, o LASER resolve as equações de "slowing-down" em 50 grupos de energia, utilizando a aproximação de Greuling-Goertzel. Na aproximação B-1, os dois primeiros coeficientes de Legendre do fluxo são dados por :

$$\Sigma_t(u) \phi_0(u) - iB \phi_1(u) = \phi_0(u) \Sigma_s(u) - \sum_i \frac{\partial q_i(u)}{\partial u} + S_0(u) \quad (D.1)$$

$$g \frac{\Sigma_t(u) \phi_1(u) - iB \phi_0(u)}{3} = \phi_1(u) \sum_i \Sigma_s(u) \bar{\mu}_{0,i} - \sum_i \frac{\partial p_i(u)}{\partial u} + S_1(u) \quad (D.2)$$

onde : u = variável letargia; B² = "buckling"; S₀(u) e S₁(u) = coeficientes de Legendre na expansão do termo fonte em polinômios de Legendre; e

$$g(u) = \frac{X}{3} \frac{\arctg X}{1 - \frac{\arctg X}{X}} \quad (D.3), \quad X = \frac{B}{\Sigma_t(u)} \quad (D.4)$$

Se $g = 1$ tem-se a aproximação P-1.

As equações de "slowing down" são :

$$\frac{\gamma_i \partial q_i(u)}{\partial u} + q_i(u) = \xi_i(u) \phi_0(u) \Sigma_{\epsilon_i}(u) \quad (D.5)$$

e

$$\frac{\zeta \xi_i \partial p_i(u)}{\partial u} + p_i(u) = \eta_i \phi_1(u) \Sigma_{\epsilon_i}(u) \quad (D.6)$$

Valores particulares para os parâmetros γ , ξ , ζ e η definem as várias aproximações de "slowing down". Na aproximação Greuling-Goertzel usada no LASER, considera-se :

$$\gamma_i \neq 0, \gamma_h = 1, \xi_i \neq 0, \xi_h = 1, \zeta_i = \eta_i = 0. \quad (D.7)$$

No cálculo do fluxo de nêutrons, os termos fonte nas equações (D.1) e (D.2) são a soma da fonte de fissão e a contribuição do espalhamento inelástico, que são assumidos isotrópicos. Logo, podemos escrever :

$$S_0(u) = f_p(u) + w(u) \quad (D.8)$$

$$S_1(u) = 0$$

onde : $f_p(u)$ = espectro de fissão pronto normalizado; e

$w(u)$ = fonte de espalhamento inelástico isotrópico, sendo

$$w(u) = \int_0^u du' \Sigma_{in}(u', u) \cdot \phi_0(u') \quad (D.9)$$

Um cálculo é realizado com fuga zero ($B^2 = 0$) e todas as secções de choque de captura colocadas igual a zero, exceto para o U-238. Um cálculo iterativo é executado com os fatores de auto-blindagem (L) para o U-238 até que os valores de w^{238} calculados com os resultados do MJFT concorde com os valores de w^{238} calculados pela equação :

$$w^i = \frac{1 - p^i}{p^i} \quad (D.10)$$

onde : p^i = probabilidade de escape à ressonância do nuclídeo i , e

w^i = razão da captura de nêutrons não térmicos no elemento i pelos nêutrons termalizados.

No intervalo de energia de $0 \leq E \leq 1,855$ eV, a equação integral de transporte de nêutrons, sujeita à espalhamento isotrópico, é escrita da forma :

$$\phi(\bar{r}, E) = \int_V d\bar{r}' T(\bar{r}, \bar{r}'; E) \left[S(\bar{r}', E) + \int_0^{E^*} dE' P(\bar{r}'; E, E') \phi(\bar{r}', E') \right] \quad (D.11)$$

E^* = energia de corte térmica ("cut-off").

T = kernel de transporte (fluxo em \bar{r} devido à uma fonte unitária isotrópica de energia E em \bar{r}').

P = kernel de espalhamento isotrópico.

O THERMOS resolve a equação (D.11) numericamente dividindo a energia e geometria espacial em subintervalos e usando um procedimento iterativo.

Para eliminar erros devido à cilindrização da célula, o LASER utiliza um anel de espalhamento isotrópico rodeando a célula.

O código THERMOS normalmente assume uma composição homogênea dentro de cada uma das misturas. No LASER, a composição do combustível na vareta combustível pode variar espacialmente. Isto permite ao programa considerar o "buildup" não uniforme e a queima dos isótopos na vareta combustível quando uma cálculo de transmutação é executado .

A equação (D.11) é resolvida em 35 grupos de energia, fornecendo assim uma boa representação da ressonância do Pu-239 em 0,3 eV e a ressonância do Pu-240 em 1,0 eV .

Para cálculo do núcleo de espalhamento tem-se duas opções, uma é a opção de "kernel" de gás livre (Wigner-Wilkins), e a outra é o "kernel" de espalhamento do proton ligado (Nelkin) . Quando o "kernel" de Nelkin é usado, uma correção para espalhamento anisotrópico é efetuada. Neste caso, calcula-se o "kernel" de transporte corrigido (P^T), definido como :

$$P^T(\bar{r};E,E') = N(\bar{r})[\sigma_{s_0}(E,E') - \sigma_{s_1}(E)\delta(E-E')] \quad (D.12)$$

onde : N = concentração atômica do hidrogênio ou deutério ;

$\sigma_{s_0}(E,E')$ = "kernel" de espalhamento isotrópico;

$\sigma_{s_1}(E)$ = coeficiente de 1ª ordem na expansão de $\sigma_{s_0}(E,E';\bar{\Omega},\bar{\Omega}')$ em polinômios de

Legendre do argumento $\mu = \bar{\Omega} \cdot \bar{\Omega}'$.

No cálculo de fluxo de nêutrons térmicos, o termo fonte $S(\bar{r},E)$ na equação (D.11) é a fonte de moderação das energias acima do "cut-off" térmico :

$$S(\bar{r}, E) = \int_E^{\infty} dE' P(\bar{r}; E, E') \phi(\bar{r}, E') \quad (D.13)$$

Na equação (D.13), o fluxo $\phi(\bar{r}, E)$ é assumido ser separável em espaço e energia. A distribuição espacial do fluxo epitérmico é assumido constante através da célula, e a dependência energética tem a forma assintótica E^{-1} . A fonte de moderação é assumida isotrópica, e o "kernel" de gás livre é usado para cada elemento da célula para calcular a fonte total.

No processo iterativo usado pelo THERMOS, a fonte de moderação é normalizada à unidade. Desde que a equação não homogênea (D.11) é linear no fluxo, a solução convergida $\phi(\bar{r}, E)$ é normalizada tal que a fonte de moderação total dentro do grupo térmico iguale a fonte de moderação como determinada pelos cálculos do programa MUFT .

$$\int_{\bar{r}} d\bar{r} \int_0^{\infty} dE S(\bar{r}, E) = Q_{th} V \quad (D.14)$$

onde : Q_{th} = densidade de moderação total calculada pelo MUFT, e.

V = volume da célula .

A secção de choque de absorção na ressonância é dada pela expressão :

$$\sigma_a(E) = \sigma_{a_0} \left(\frac{E_0}{E} \right)^{1/2} \quad (D.15)$$

onde : σ_{a_0} = secção de choque no pico da ressonância à energia E_0

Na absorção térmica, a secção de choque é representada pela função forma Ψ calculada usando a fórmula de Adler.

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{\frac{4}{\pi} \pi t}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{1+y^2} e^{-\frac{(x-y)^2}{4t}} \quad (D.16)$$

com :

$$x = \frac{2(E-E_0)}{\Gamma} \quad (D.17) ; t = \frac{4 E_0 K T}{A \Gamma^2} \quad (D.18)$$

onde:

Γ = largura de contorno total; T = temperatura do absorvedor, e K = constante de Boltzman .

O coeficiente de difusão térmico é calculado com a distribuição de fluxo convergido.

$$D_{th} = \frac{\int_0^{E^*} dE [\Sigma_{tr}(E)]^{-1} \int_{\bar{r}} d\bar{r} \phi(\bar{r}, E)}{\int_0^{E^*} dE \int_{\bar{r}} d\bar{r} \phi(\bar{r}, E)} \quad (D.19)$$

onde : $\Sigma_{tr}(E)$ é a secção de choque de transporte ponderada sobre o volume celular.

$$\Sigma_{tr}(E) = \frac{\int_{\bar{r}} d\bar{r} \sum_i N_i(\bar{r}) \sigma_{tr_i}(E) \phi(\bar{r}, E)}{\int_{\bar{r}} d\bar{r} \phi(\bar{r}, E)} \quad (D.20)$$

onde : $N_i(\bar{r})$ = concentração atômica, e a soma em i inclui todos os elementos da célula.

Para todos os elementos exceto para o hidrogênio e deutério, a secção de choque de transporte é calculada da forma :

$$\sigma_{tr_i}(E) = \sigma_{s_i}(E) + (1 - \bar{\mu}_0) \int_0^{E^*} dE' P_i(E', E) \quad (D.21)$$

onde : P_i = "Kernel" de espalhamento; e

$$\bar{\mu}_0 = \frac{2}{3} A, \text{ com } A = \text{massa atômica.}$$

Para o hidrogênio e deutério (com o "Kernel" de Nelkin), a secção de choque de transporte é obtida pelo "Kernel" de transporte corrigido :

$$\sigma_{tr \text{ H ou D}}(E) = \sigma_{s \text{ H ou D}}(E) + \int_0^{E^*} dE' P_{\text{H ou D}}^T(E', E) \quad (D.22)$$

O programa LASER também oferece a opção de pesquisa de "buckling", onde a fuga térmica varia de iteração para iteração através do termo $D_{th} B^2$.

O fluxo térmico, calculado pelo THERMOS, é normalizado tal que a absorção total térmica mais a fuga, iguale à fonte de moderação obtida nos cálculos do MUFT . O fluxo inicial e o fluxo no final de cada "time step" são normalizados por uma densidade de potência constante, fornecida como parâmetro de entrada da célula.

APÊNDICE E : O programa CITATION

É normalmente usado para resolver problemas que envolvem a teoria de difusão de nêutrons pelo método de diferenças finitas no espaço. O programa pode resolver cálculos de transmutação, calcular o fluxo adjunto, e como feito neste trabalho, pode-se estudar problemas de auto-valor usando as secções de choque macroscópicas do sistema fornecidas através de um processamento preliminar (como o realizado pelo sistema HAMMER-TECHNION). Neste tipo de cálculo, o fluxo de nêutrons, calculado por iteração direta, é usado para determinar o fator de multiplicação ou a densidade dos núclídeos requerida para um sistema crítico. Os cálculos podem ser realizados em geometria unidimensional, bidimensional ou em três dimensões, sendo as regiões discretizadas em finos "mesh-points", como mostrado na Tabela E.1.

Tabela : E.1
Representação dos "mesh-points" no CITATION

GEOMETRIA	Placa	Cilindro	Cilindro	Esfera	Hexagonal
Coordenadas Mesh Points	X, Y, Z J _x , I _y , M _z	R, Z J _r , I _z , M _z	R, Z J _r , I _z	R J _r	X, Y, Z, J _x , I _y , M _z
Vol. Região	$\Delta_x \Delta_y \Delta_z$	$\Delta_r \Delta_z \Delta r_z^2$	$\pi \Delta_z \Delta r_0^2$	$4\pi \Delta r_c^2$	$\Delta_x \Delta_y \Delta_z A$

onde : $\Delta r_z^2 = (r_1^2 - r_f^2)/2$

: $\Delta r_0^2 = (r_1^2 - r_f^2)$

: $\Delta r_c^2 = (r_1^2 - r_f^2)/3$

: $A = \sqrt{3} / 2$

No CITATION, define-se zona como a localização geométrica dentro da qual as propriedades nucleares macroscópicas são assumidas constantes, e região, refere-se a localização geométrica dentro da qual os "mesh-points" são especificados.

As condições de simetria e fluxo zero na superfície da região, é dada pela condição de distância extrapolada ao longo do contorno do reator :

$$\frac{D}{\phi} \frac{d\phi}{dx} = C = \frac{D}{\text{dist. extrapolada}} \quad (\text{E.1})$$

Considerando $D = (\lambda_{tr}/3)$ e a distância extrapolada de $0,7104 \lambda_{tr}$, obtém-se $C = 0,4692$. Quando $C = 0$ tem-se uma superfície simétrica. Para C muito grande verifica-se que a distância extrapolada tende à zero e conseqüentemente o fluxo de nêutrons torna-se nulo na superfície.

A equação básica que expressa a aproximação de difusão de transporte de nêutrons de energia E na região r , é dada por :

$$\begin{aligned} & -\nabla D_{r,E} \nabla \phi_{r,E} + (\Sigma_{a,r,E} + \Sigma_{s,r,E}) \phi_{r,E} = \\ & = \int_{E'} (\Sigma_{r,E' \rightarrow E} + \left(\frac{\chi_E(\nu E)}{K_e} f_{r,E,E'} \right) \phi_{r,E'} dE' \quad (\text{E.2}) \end{aligned}$$

O espectro de energia contínuo é dividido em grupos de energia discretos, a função distribuição de fonte, χ , é considerada independente da posição, e após uma simplificação no termo de transporte, obtém-se :

$$\begin{aligned}
 -D_{r,g} \nabla^2 \phi_{r,g} + (\Sigma_{a,r,g} + \sum_n \Sigma_{s,r,g \rightarrow n} + D_{r,g} B_{\perp g}^2) \phi_{r,g} = \\
 = \sum_n (\Sigma_{s,r,n \rightarrow g} + \frac{\chi_g (\nu \Sigma)_{f,r,n}}{K_e}) \phi_{r,n} \quad (E.3)
 \end{aligned}$$

onde:

∇^2 = operador geométrico Laplaciano ;

$\phi_{r,g}$ = fluxo de nêutrons na posição r e grupo de energia g (nêutron/sec-cm²);

$\Sigma_{a,r,g}$ = Secção de choque macroscópica de absorção, normalizada pelo espectro de energia do fluxo representativo (cm⁻¹) ;

$\Sigma_{s,r,g \rightarrow n}$ = Secção de choque macroscópica de espalhamento de nêutrons do grupo de energia g para o grupo de energia n (cm⁻¹) – o conjunto destas secções de choque forma o "kernel" de espalhamento ;

$D_{r,g}$ = Coeficiente de Difusão (cm) – normalmente corresponde ao inverso de três vezes a secção de choque de transporte ;

$B_{\perp g}^2$ = Termo correspondente ao "buckling" (cm⁻²) – para se considerar o efeito do operador laplaciano em uma dimensão não tratada explicitamente (fuga) .

$\nu \Sigma_{f,r,g}$ = Secção de choque de produção macroscópica (cm⁻¹) – ν é o número médio de nêutrons produzidos por um nêutron absorvido e Σ_f é a secção de choque de fissão) ;

χ_g = Função distribuição para fontes de nêutrons (normalmente $\sum_g \chi_g = 1,0$) ;

K_e = Fator de multiplicação efetivo – razão da taxa de produção de nêutrons pela taxa de perda de nêutrons por todas as causas possíveis – .

Quando se deseja considerar a variação das concentrações dos núclídeos no cálculo do arranjo crítico, a equação E.3 pode ser arranjada, obtendo-se a equação E.4, onde o h é um autovalor do problema associado com a densidade do núclídeo de interesse, $\Sigma_{b,r,g}$ e

$\Sigma_{p,r,n}$ são as secções de choque de absorção e produção referentes aos núclídeos e associadas a um valor unitário de h.

$$\begin{aligned}
 & -\nabla^2 D_{r,g} \phi_{r,g} + (\Sigma_{a,r,g} + h\Sigma_{b,r,g} + \Sigma \Sigma_{s,r,g-n} + D_{r,g} B_{1g}^2) \phi_{r,g} = \\
 & = \Sigma \left[\Sigma_{s,r,n-g} + \frac{\chi_g}{\lambda_g} (\nu\Sigma_{f,r,n} + h\nu\Sigma_{p,r,n}) \right] \phi_{r,n} \quad (E.4)
 \end{aligned}$$

Uma opção do programa CITATION é determinar as secções de choque macroscópicas a partir de dados microscópicos dos núclídeos individuais, considerando assim as variações nas concentrações dos núclídeos. O programa assume as densidades dos núclídeos em átomos/barn-cm e suas secções de choque microscópicas em barn, e calcula as taxas de reação e transmutação, determinando o balanço de massa. As equações utilizadas neste processo são mostradas abaixo :

$$\Sigma_{a,g,z} = \Sigma_n N_{n,z} \sigma_{a,n,g}$$

$$\Sigma_{f,g,z} = \Sigma_n N_{n,z} \sigma_{f,n,g}$$

$$\nu\Sigma_{f,g,z} = \Sigma_n N_{n,z} \nu\sigma_{f,n,g}$$

com :

$$\nu\sigma_{f,n,g} \equiv \nu_{n,g} \sigma_{f,n,g}$$

$$\Sigma_{tr,g,z} = \Sigma_n N_{n,z} \sigma_{tr,n,g}$$

$$D_{g,z} = \frac{1}{3 \Sigma_{tr,g,z}}$$

$$\Sigma_{s,g-k} = \Sigma_n N_{n,z} \sigma_{s,g-k} \quad (E.5)$$

aqui os subscritos referem-se à :

a = absorção , f = fissão , n = núclídeo , z = zona , g e k = grupo de energia
tr = transporte , s = espalhamento .

Para determinar as taxas de reação, escreve-se a potencia térmica do reator da forma :

$$P = 10^6 \frac{C_1}{C_2} \sum V_z \sum N_{n,z} W_{n,z} \sum \bar{\phi}_{g,z} \sigma_{f,n,g} \quad (E.6)$$

Na expressão acima, $W_{n,z}$ é a energia liberada na fissão do nuclídeo (J/fissão), C_1 é a fração útil da potência especificada e C_2 é a fração da potência especificada referente ao núcleo tratado. O valor do fluxo é ajustado tal que a potência P calculada seja o valor especificado. Os valores de $\bar{\phi}_{g,z}$ são ponderados nos volumes (V_z) das zonas em cada energia, que são dados pela expressão :

$$\bar{\phi}_{g,z} = \frac{\sum_i \phi_{i,g} V_i}{V_z} \quad (E.7)$$

aqui a somatória é realizada sobre todos os "mesh-points" i em cada zona z .

Para cada zona, as taxas de reação individuais dos nuclídeos são interpretadas da seguinte forma :

$$\text{Absorção} = N_{n,z} \sum_{\Pi} \phi_{g,z} \sigma_{a,n,g}$$

$$\text{Captura} = \text{Absorção} - N_{n,z} \sum_g \bar{\phi}_{g,z} \sigma_{f,n,g}$$

$$\text{Produção} = N_{n,z} \sum_g \phi_{g,z} \nu \sigma_{f,n,g}$$

As somatórias das equações acima são realizadas sobre todo o sistema. Para estimar as taxas de reação médias durante os cálculos de transmutação, faz-se uma média aritmética das densidades dos nuclídeos entre o início e fim de cada "time step" .

O fator de multiplicação (auto valor na resolução de problemas de criticalidade), é obtido no procedimento iterativo e é dado pela expressão :

$$K_{c,t} = \frac{P_{s,t}}{A_{s,t} + L_{s,t}} \quad (E.8)$$

onde :

$$P_{s,t} = \sum_i V_i \sum_i \nu \Sigma_{f,i,g} \phi_{i,g,t} \quad (E.9)$$

$$A_{s,t} = \sum V_i \sum \Sigma_{a,i,g} \phi_{i,g,t} \quad (E.10)$$

A quantidade $L_{s,t}$ dá as perdas através da superfície externa do reator, incluindo o termo DB_1^2 . Os subscritos i e t referem-se aos "mesh-points" e "outer iteration" respectivamente .

APÊNDICE F : O Sistema Acoplado NJOY – AMPX-II

As bibliotecas de dados nucleares térmica e epitérmica, que alimentam o sistema HAMMER-TECHNION, atualmente podem ser obtidas por um procedimento desenvolvido na Divisão de Física de Reatores (RTF), o qual faz um acoplamento entre os sistemas NJOY e AMPX-II. Nesse procedimento, pode-se tratar as ressonâncias na região de energia térmica e desenvolver o alargamento Doppler, o que não é feito pelo programa FLANGE-II que produz a biblioteca térmica original do HAMMER. Além disso, o sistema NJOY é mais conceituado do ponto de vista de metodologia de cálculo e computacional.

O processamento começa com os arquivos de dados nucleares básicos ENDF/B-IV ou JENDL-2. Segue abaixo uma breve descrição dos módulos do sistema acoplado NJOY – AMPX-II acessados no processamento das bibliotecas utilizadas neste trabalho.

MODER : é o módulo que acessa o arquivo de dados nucleares básicos, transformando um arquivo ENDF formatado, em um arquivo binário e vice-versa.

RECONR : reconstrói as secções de choque em uma forma pontual a partir dos parâmetros de ressonância e das leis de interpolação do ENDF/B e escreve o arquivo final denominado PENDF (Pointwise Evaluated Nuclear Data File) de tal forma que as secções de choque sejam linearmente interpoláveis dentro de uma precisão pré-fixada. Para um dado nuclídeo, o número de pontos de energia, é único para todas as reações.

BROADR : lê o arquivo PENDF gerado pelo módulo RECONR e elabora o alargamento Doppler de todas as reações do nuclídeo desejado deste arquivo, na

temperatura desejada. O arquivo final é escrito em um único arranjo de pontos de energia, de uma forma linearmente interpolável dentro de uma precisão pré-fixada.

UNRESR : produz secções de choque efetivas na região de ressonâncias não resolvidas. Neste trabalho, estes dados foram calculados em diluição infinita e à temperatura de 300K. Os dados finais são escritos em uma forma tabular : secções de choque versus temperatura e secções de choque de "background".

THERMR : produz as secções de choque e as matrizes de espalhamento na região térmica de energia do nêutron. Este módulo do sistema NJOY utiliza as leis de espalhamento térmico $S(\alpha, \beta)$, para os materiais que possuem estes dados, como o hidrogênio ligado à molécula de água ou o carbono na grafita. Os dados finais, também em uma forma linearmente interpolável, para uma precisão pré-fixada, são adicionados no arquivo PENDF.

Até o módulo THERMR, os dados nucleares produzidos são independentes da aplicação. O único parâmetro que restringe o uso destes dados nucleares é a temperatura utilizada no alargamento Doppler e a temperatura utilizada na matriz de espalhamento térmico.

GROUPE : processa as secções de choque pontuais em parâmetros de multigrupo utilizando o método de Bondarenko. Neste ponto, o elo de ligação entre os dados nucleares independentes da aplicação, e os dados nucleares para a aplicação específica, é introduzido através da estrutura de multigrupo e do espectro de ponderação. A função de ponderação escolhida foi uma Maxwelliana à temperatura de 0,0253 eV na região de energia térmica do nêutron (1,0 E-05 eV a 0,625 eV -para o "cut-off" original - e de 1,0 E-05 eV a 1,855 eV

—para o novo "cut-off" implementado no sistema HAMMER-TECHNION). Na região de energia epitérmica (energias acima do "cut-off" até 0,82 MeV) utilizou-se uma função de ponderação do tipo $1/E$, e na região de energia rápida (0,82 MeV a 20,0 MeV) utilizou-se o espectro de fissão à temperatura correspondente a 1,40 MeV. Aqui são produzidas as secções de choque de multigrupo para aplicação nos problemas padrões estudados neste trabalho.

AMPXR : transforma os dados nucleares de multigrupo calculados com o módulo GROUPT em um formato compatível com a biblioteca MASTER do sistema AMPX-II.

RADE : verifica a consistência da formatação efetuada pelo módulo AMPXR, analisando se a secção de choque total é igual a soma das partes e se as matrizes de espalhamento são convenientemente normalizadas nos processos nucleares unidimensionais correspondentes.

BRDROL : tem a finalidade de transformar os dados nucleares pontuais (PENDF) do sistema NJOY para um formato compatível com o módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II.

ROLAIDS : resolve a equação integral de transporte de nêutrons, ponto a ponto de energia, na região de ressonâncias resolvidas, assumindo espalhamento isotrópico, e produzindo como resultado final as secções de choque efetivas (auto-blindadas) entre os multigrupos da biblioteca MASTER compreendidos entre a energia mínima e a energia máxima de aplicabilidade.

CLAROL : substitui as secções de choque auto-blindadas calculadas pelo ROLAIDS na biblioteca MASTER do sistema AMPX-II .

COMET : executado para corrigir possíveis erros nas seções de choque totais e nas matrizes de espalhamento. O módulo **RADE** pode ser executado em seguida ao **COMET** para se verificar se este módulo foi executado com êxito.

NITAWL : formata a biblioteca **MASTER** para que a mesma possa ser utilizada nos códigos de interesse, neste trabalho, a formatação pelo **NITAWL** foi realizada visando a subsequente utilização desta biblioteca no sistema **HAMMER-TECHNION**.

Outra possibilidade de formatação da biblioteca **MASTER** pelo módulo **NITAWL**, é a compatibilidade com a biblioteca **WORKING** utilizada pelo módulo **XSDRNPM** do sistema **AMPX-II**. Este módulo resolve a equação de transporte de nêutrons unidimensional pelo método S_n , e fornece como resultado, entre outros parâmetros, como o fator de multiplicação infinito, as seções de choque colapsadas numa estrutura de grupos de energia conveniente para a aplicação de interesse.

A Figura F.1 apresenta um diagrama de blocos ilustrando a sequência dos módulos que compõem o sistema acoplado **NJOY - AMPX-II**.

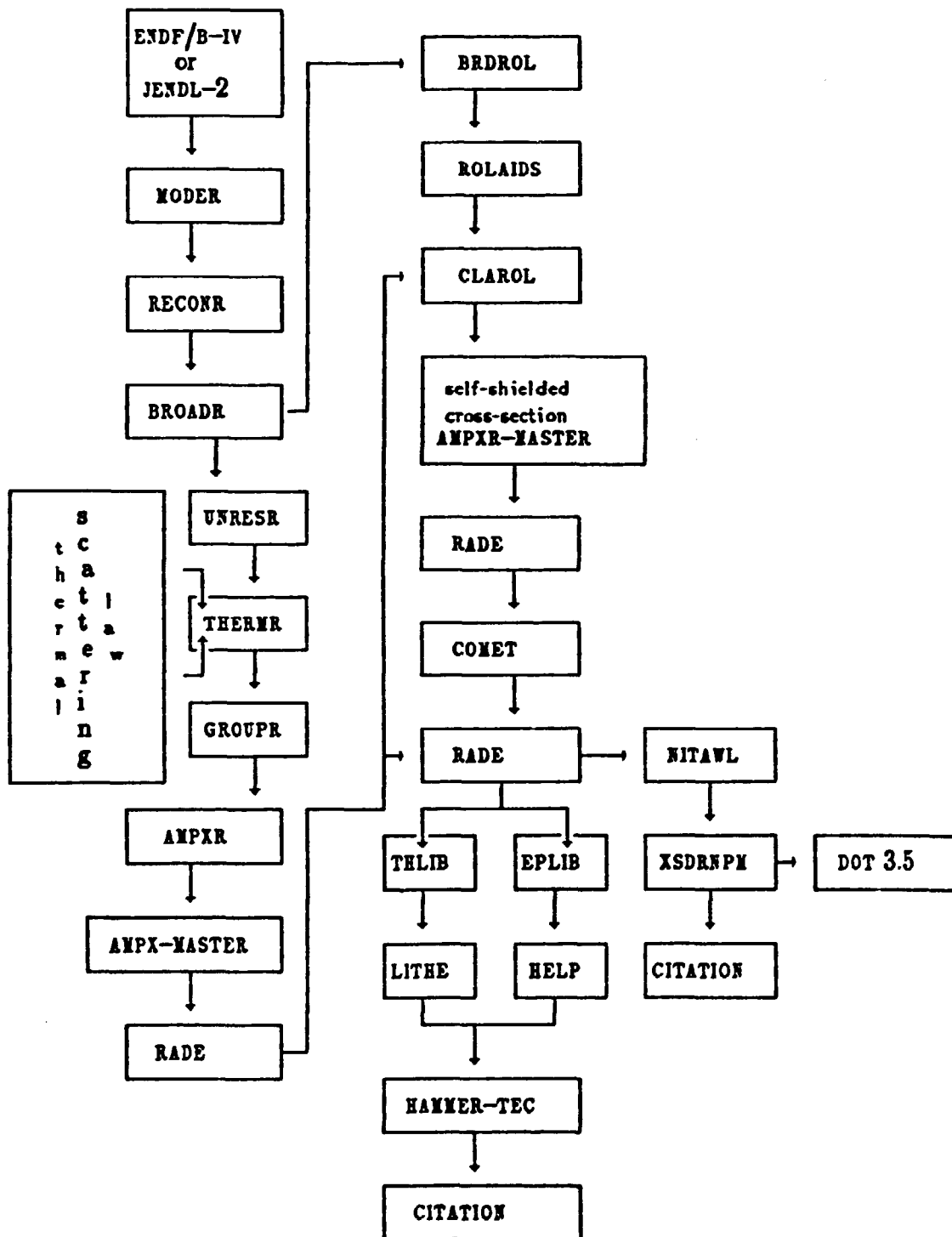


Figura F.1 - Diagrama de módulos do sistema acoplado NJOY-AMPX-II

Referências Bibliográficas.-

- 1 ALINE, P.G. & McWHORTER, R.J. The effective value of η for Pu-239. Trans. Am. Nucl. Soc., 5:369-70, 1962 .
- 2 AMOUYAL, A.; BENOIST, P.; HOROWITZ, J. Nouvelle methode de determination du facteur d'utilisation thermique d'une cellule. J. Nuclear Energy, 6:79-98, 1957.
- 3 ARONSON, A. & ROTHENSTEIN, W. ETOG-3 : modifications for HAMMER with ENDF/B-IV data , Haifa, Israel Institute Technology, 1976, (suppl. 1977) .
- 4 ASKEW, J.R.; FAYER, F.J.; KENSHELL, P.B. A general description of the lattice code WINS , J. Brit. Nucl. Energy Soc., 15:15-64, 1966.
- 5 BARHEN, J.; ROTHENSTEIN, W.; TAVIV, E. The HAMMER code system , Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., 1978 (EPRI-NP-565-Project 709).
- 6 BARRY, R.F. LEOPARD - a spectrum dependent, non spatial depletion code for the IBM-7094, Pittsburg, PA, Westhingham Electric Corp., 1963 . (WCAP-3269-26)

- 7 BEHRENS, J.W. & HOWERTON, R.J. Predictions of fission cross sections in the 3 to 5 MeV neutron energy range. Nucl. Sci. Eng., 65:464-67, 1978 .
- 8 BELL, G.I. & GLASTTONE, S. Nuclear reactor theory , New York, Addison-Wesley, 1966.
- 9 BENEDICT, M.; PIGFORD, T.H.; LEVI, H.W. Nuclear chemical engineering , 2nded. New York, McGraw-Hill, 1981 .
- 10 BOHL, H. Jr.; GELBARD, E.M.; RYAN, G.H. MUFT-4: a fast neutron spectra code , Pittsburg, PA, Bettis Atomic Power Lab., 1957 . (WAPD-TM-22) .
- 11 BONDARENKO, I.I. Group constants for nuclear reactor calculations, Consultants Bureau, New York, New York, 1964 .
- 12 BOSLER, G.E.; PHILLIPS, J.R.; WILSON, W.B.; LABAUVE, R.J.; ENGLAND, T.R. Production of actinide isotopes in simulated PWR fuel and their influence on inherent neutron emission . Los Alamos, NM, Los Alamos Scientific Labs., 1982. (LA-9343)
- 13 BREIT, G. & WIGNER, E. Capture of slow neutrons. Phys. Rev., 49:519, 1936.
- 14 CARLVIK, I. The Dancoff correction in square and hexagonal lattices. Nucl. Sci. Eng., 29:325-36, 1967 .

- 15 CELNIK, J. & KELLMAN, S. Evaluation of some nuclear calculational methods for use in plutonium recycle. Trans. Am. Nucl. Soc., 10:305-6, 1967.
- 16 CHALHOUB, E.S. & ANAF, J. Validação dos códigos ETOG-3 e FLANGE-II no que tange à contribuição de ressonâncias e secções de choque de referência. São José dos Campos, Instituto de Estudos Avançados, Abr. 1988. (IEAv-008/88)
- 17 CHALHOUB, E.S. & ANAF, J. Gerção e testes da nova biblioteca versão 88, para o sistema HAMMER. São José dos Campos, Instituto de Estudos Avançados, ago. 1988. (IEAv-024/88)
- 18 CHALHOUB, E.S. & ANAF, J. Avaliação dos códigos ETOG-3, FLANGE-II, XLACS, NJOY e LINEAR/RECENT/GROUPIE no que tange à contribuição de ressonâncias e secções de choque de referência. São José dos Campos, Instituto de Estudos Avançados, dez 1988. (IEAv-065/88)
- 19 CHAWLA, R.; GMUR, K.; HAGER, H. Reactivity and reaction rate ratio changes with moderator voidage in a light water high converter reactor lattice. Nucl. Technol., 67:360-73, 1984.
- 20 CRITOPH, E. Effective cross sections for U-235 and Pu-239. Chalk River, ON, Atomic Energy of Canada Ltd., 1964. (AECL-1101 add.)
- 21 DAWSON, F.G. Plutonium utilization program - FY 1967 through 1970 : program analysis and plans. Richland, WA, Battele Pacific Northwest Labs., 1966. (BNWL-298)

- 22 DAWSON, F.G. Plutonium utilization program : annual report-Fiscal year 1967. Richland, WA, Battele Pacific Northwest Labs., 1967. (BNWL-624)
- 23 DAWSON, F.G. Plutonium utilization program : technical activities quarterly report-March-May 1969. Richland, WA, Battele Pacific Northwest Labs., 1969. (BNWL-1106)
- 24 DUDERSTADT, J.J. & HAMILTON, L.J. Nuclear reactor analysis. New York, John Wiley, 1975.
- 25 EICH, W.J. Analysis of $\text{PuO}_2\text{-UO}_2$ critical experiments. Trans. Am. Nucl. Soc., 10:306-7, 1967.
- 26 EILAND, H.M.; ESCH, L.J.; FEINER, F.; MEWHERTER, J.L. Epithermal measurements of capture and fission resonance integrals in U-235, U-238, Pu-239 and Pu-241. Nucl. Sci. Eng., 44:180-9, 1971 .
- 27 ENGLE Jr., W.W. A users manual for ANISN, a one dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering, Union Carbide Corp., Nuclear Division, K-25 Report K-1693 , 1967.
- 28 FERREIRA, C.R. & SANTOS, A. Análise de criticalidade utilizando-se os sistemas NJOY, AMPX-II e KENO-IV, 215,1, Anais do VII Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, Recife, PE, Brasil, (abril 1989).

- 29 FODERARO, A. The elements of neutron interaction theory. Cambridge, MIT , 1971 .
- 30 FOWLER, T.B.; VONDY, D.R.; CUNNINGHAM, G.W. Nuclear reactor core analysis code : CITATION . Oak Ridge National Lab., 1971. (ORNL-TM-2496, Rev. 2)
- 31 GARBER, D.; DUNFORD, C.; PEARLSTEIN, S. ENDF-102 : data formats and procedures for the evaluated nuclear data file, ENDF. Upton, NY, Brookhaven National Lab., 1983. (BNL-NCS-50496)
- 32 GRAVES, W.E. & FINCH, D.R. Quantitative consistency testing of thermal Benchmark lattice experiments. Trans. Am. Nucl. Soc., 22:888-90, 1975.
- 33 GREENE, N.M.; FORD III, W.E.; LUCAS, J.C.; WHITE, J.E.; PETRIE, L.M.; WRIGHT, R.Q. AMPX-II: a modular code system for generating coupled multigroup neutron gamma-ray cross-sections libraries from data in ENDF format. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., 1976. (ORNL-TM-3706)
- 34 GUIMARÃES, L.N.F. Desenvolvimento do sistema HAMMER-ORIGEN-2 . Rio de Janeiro, 1984 (Dissertação de mestrado, Instituto Militar de Engenharia).

- 35 HOFFMAN, A.; PIERRE, J.P.; KAVENOKY, A.; LIVOLANT, M.; LORAIN, H. APOLLO : code multigroupe de resolution d l'equation du transport pour les neutrons thermiques et rapides. Gif-sur-Yvette, CEA Centre d'Etudes Nucleaires de Saclay, mar. 1973. (CEA-N-1610)
- 36 HONECK, H.C. The distribution of thermal neutrons in space and energy in reactor lattices. Part I. Theory. Nucl. Sci. Eng., 8:193-202, 1960 .
- 37 HONECK, H.C. THERMOS : a thermalization transport theory code for reactor lattice calculations . Upton, NY, Brookhaven National Lab., 1962. (BNL-5826)
- 38 HONECK, H.C. & FINCH, D.R. FLANGE-II (Version 71-1): a code to process thermal neutron data from an ENDF-B tape. Aiken, SC, Du Pont de Nemours (E.I.) and Co., 1971. (DP-1278)
- 39 HURIA, H.C. Evaluation of the lattice physics code MURLI for light water systems. Ann. Nucl. Energy, 8:183-98, 1981 .
- 40 ISHIGURO, Y. A rigorous expression for shape of a doppler-broadened resonance. Nucl. Sci. Eng., 24:375-80, 1966.
- 41 ISHIGURO, Y. Exact treatment of the resonance absorption of neutrons of intermediate energy., Nucl. Sci. Eng., 32:422-5 , 1967.

- 42 JENQUIN, E.P.; LEONARD, B.R. Jr.; UOTINEN, V.O.; STEWART, K.B. Effect of ENDF/B-II data for ^{238}U on critical correlations., Trans. Am. Nucl. Soc., 15:461-2, 1972 .
- 43 KERntechnische Gesellschaft, V. Nuclear data, cross section libraries and their application in nuclear technology: seminar on..., held in Bonn, 1-2 Oct., 1985. s.n.t. (INIS-mf-9895)
- 44 KOPPEL, J.U. & HOUSTON, D.H. Reference manual for ENDF thermal neutron scattering data, General Atomic Report GA-8774, National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, 1978. (ENDF-269).
- 45 LAMARSH, J.R. Introduction to nuclear reactor theory. New York, Addison-Wesley, 1966 .
- 46 LEONARD, B.R. Physics of plutonium in thermal reactor thermal cross section of plutonium isotopes and the 1968-1969 IAEA review. Trans. Am. Nucl. Soc., 12:226-7, 1969 .
- 47 LIKALA, R.C.; STINSON, W.P. Experimental and analytical results for $\text{PuO}_2\text{-UO}_2\text{-H}_2\text{O}$ lattices. Trans. Am. Nucl. Soc., 9:127-8, 1966 .
- 48 LIKALA, R.C.; UOTINEN, V.O.; JENQUIN, U.P. Uncertainties in the analysis of plutonium fueled light water moderated assemblies. Richland, WA, Battelle Pacific Northwest Labs., 1973. (BNWL-1656)

- 49 MARTINEZ, A.S.; TEIXEIRA, A.R.; ROSA, L.P. Modificações no código LEOPARD no cálculo do fluxo de neutrons em reatores a água sob pressão. Publicação da COPPE/UFRJ , PTC 25/78 .
- 50 MC FARLANE, R.E.; MUIR, D.W.; BOICOURT, R.M. The NJOY nuclear data processing system: user's manual. Los Alamos, NM, Los Alamos Scientific Lab., 1982. v.1. (LA-9303-M)
- 51 MUKAIYAMA, T.; TAKANO, H.; TAKIZUKA, T.; OGAWA, T.; GUNJI, Y.; OKAJIMA, S. Higher actinides transmutation using higher actinide burner reactors , International conference on the physics of reactors:operation,design and computation, Marseille, France 1990 , PHYSOR, 1:1.97-107.
- 52 NEWMAN, D.F. Measurement of Kinf and relative reaction rates in an H₂O moderated UO₂-PuO₂ particulate fueled lattice., Nucl. Technol., 15: 192-208, 1972 .
- 53 NICHOLS, P.F. Reactivity determination of the effective resonance integral of Pu-240 in Pu-Al rods. Trans. Am. Nucl. Soc., 5:374-5, 1962 .
- 54 NODERER, L.C. & O'SHEA, D.M. Integral transport method for burnup in heterogeneous assemblies., Trans. Am. Nucl. Soc., 10:303-4, 1967 .
- 55 NORDHEIN, L.W. & KUNIUR, G.F. A program of research and calculations of resonance absorption. San Diego, CA, Gulf General Atomic Co., 1961. (GA-2527)

- 56 OLDEKOP, W.; BERGER, H.; ZEGGEL, W. General features of advanced pressurized water reactors with improved fuel utilization , Nucl. Technol., 59:212-27, 1982.
- 57 ONUSIC JR., J. Possibilidades teóricas de cálculo do programa de computação HAMMER. São Paulo, 1978. (dissertação de mestrado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares).
- 58 OZER, O. & FIARMAN, S. ENDF/B-IV eigenvalue calculations for UO₂ and mixed-oxide critical lattice experiments. Trans. Am. Nucl. Soc., 26:596-7, 1977.
- 59 PHILLIPS, G.J. & GRIFFITHS, J. LATREP user's manual. Chalk River, ON, Atomic Energy of Canada Ltd., 1971. (AECL-3857)
- 60 PONCELET, C.G. LASER : a depletion program for lattice calculation based of Muft and Thermos. Pittsburg, PA, Westinghouse Electric Corp., 1966. (WCAP-6073)
- 61 RADKOWSKY, A. & SHAYER, Z. The high gain light water breeder reactor with a uranium plutonium cycle. Nucl. Technol., 80:190-215, 1988 .
- 62 RHOADES, W.A. Version DOT 3.5 : Two dimensional discrete ordinates radiation transport code. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., Sep. 1973. (ORNL-TM-4280)

- 63 RICHEY, C.R. Theoretical analysis of homogeneous plutonium critical experiments. Nucl. Sci. Eng., 31:32-39, 1968 .
- 64 RONEN, Y. & LEIBSON, M.J. On the "anomaly" of $^{238}\text{UO}_2 + \text{PuO}_2\text{-H}_2\text{O}$ lattices. Ann. Nucl. Energy, 15:51-3, 1987 .
- 65 ROSE, P.F.; PEARISTEIN, S.; OZER, O. Symposium summary : nuclear data problems for thermal reactor applications. Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., 1978. (EPRI-NP-1098-SY)
- 66 ROSE, P.F. Thermal-reactor Benchmark calculations, techniques, results and applications: proceedings on..., held in Upton, 17-18 May, 1982. Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., Feb. 1983. (EPRI-NP-2855)
- 67 ROTHENSTEIN, W. Thermal-reactor lattice analysis using ENDF/B-IV data with Monte Carlo resonance reaction rates. Nucl. Sci. Eng., 59:337-49, 1976.
- 68 SALVATORES, M.; CARTA, M.; SOULE, R. Power reactor and critical experiment heterogeneity effects assessment for bias factors definition. Nucl. Sci. Eng., 100:1-15, 1988 .
- 69 SANTOS, A. & FERREIRA, C.R. Elaboração de uma interface AMPX-II/HAMMER-TECHNION, a ser publicado no 3º CGEN, Rio de Janeiro, Brasil, 1990.

- 70 SANTOS, A. & LOPEZ, E.M. AMPXR e BRDROL : dois novos módulos para sistema NJOY, a ser publicado no IPEN/CNEN-SP, 1990.
- 71 SANTOS, A.; FERREIRA, C.R.; FERNANDES, M.A.R. UO₂-PuO₂ criticality analysis based on a coupled system NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION, IAEA Technical Committee Meeting on Technical and Economical Aspects of High Converters, Nurnberg, FRG, 1990.
- 72 SCHMID, L.C.; LIKALA, R.C.; STINSON, W.P.; WORDEN, J.R. Critical masses and bucklings of PuO₂-UO₂-H₂O systems. Trans. Am. Nucl. Soc., 7:216-7, 1964
- 73 SCHMIDT, E. & ROSE, P.F. Testing of the ENDF/B-V nuclear data library in thermal Benchmark experiments: final report. Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., 1987. (EPRI-NP-5058)
- 74 SEGEV, M. Group transfer matrices and their relation to basic cross section data. Nucl. Sci. Eng., 45:269-78, 1971.
- 75 SHER, R. & FIARMAN, S. Studies of thermal-reactor Benchmarks-data interpretation : experimental corrections. Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., 1976. (EPRI-NP-209),
- 76 SHER, R. & FIARMAN, S. Analysis of some uranium oxide and mixed-oxide lattice. Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., 1978. (EPRI-NP-691)

- 77 SMITH, R.I. & KONZEK, G.J. Clean critical experiment Benchmarks for plutonium recycle in LWR's (foil activation studies) : final report., Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., 1978. (EPRI-NP-196 (Vol.2))
- 78 SMITH, R.I.; KUTCHER, J.W.; LAUBY, J.H. Critical experiments with the UO_2 2% PuO_2 batch core in the PRTR. Trans. Am. Nucl. Soc., 10:185-6, 1967.
- 79 STAMATELATOS, M.G. EPRI-CELL code description ARMP : advanced recycle methodology program. Palo Alto, CA, Electric Power Research Inst., 1977. (CCM-3)
- 80 STAMM'LER, R.J.J. & ABBATE, M.J. Methods of steady-state reactor physics in nuclear design. New York, Academic, 1983.
- 81 STINSON, W.P. & UOTINEN, V.O. Destructive and nondestructive analysis of plutonium fuels used in lattice experiments. Richland, WA, Battelle Pacific Northwest Labs., 1971. (BNWL-1627)
- 82 SUICH, J.E. & HONECK, H.C. The HAMMER system. Aiken, SC, Du Pont de Nemours (E.I.) and Co., 1967. (DP-1064)
- 83 TAKEDA, T.; UNESAKI, H.; YAMAMOTO, T.; SHIRAKATA, K. Two dimensional cell heterogeneity effect in analysis of fast critical assemblies. Nucl. Sci. Eng., 98:128-38, 1987.

- 84 TAYLOR, E.G. Saxton plutonium program: critical experiments for the Saxton partial plutonium core. Pittsburg, PA, Westinghouse Electric Corp., 1965. (WCAP-3385-54)
- 85 UOTINEN, V.O. The effect of plutonium-241 decay on the analysis of plutonium critical experiments. Nucl. Sci. Eng., 42:107-9, 1970.
- 86 UOTINEN, V.O. & WILLIAMS, L.D. Experiments and calculations for H₂O- moderated assemblies containing UO₂-2wt%PuO₂ fuel rods. Trans. Am. Nucl. Soc., 10:186-7, 1967.
- 87 UOTINEN, V.O.; LAUBY, J.H.; SCHMID, L.C.; STINSON, W.P. Lattices of plutonium-enriched rods in light water - Part I: Experimental results. Nucl. Technol., 15:257-71, 1972 .
- 88 UOTINEN, V.O.; LIKALA, R.C.; JENQUIN, U.P. Lattice of plutonium-enriched rods in light water - Part II: Theoretical analysis of plutonium-fueled systems. Nucl. Technol., 15:272-96, 1972.
- 89 WESTCOTT, C.H. Effective cross section values for well-moderated thermal reactor spectra. Chalk River, ON, Atomic Energy of Canada Ltd., 1960. (AECL-1101)
- 90 WESTON, L.W. & TODD, J.H. Neutron capture cross section of plutonium-240. Nucl. Sci. Eng., 63:143-8, 1976 .

- 91 WESTON, L.W. & TODD, J.H. Neutron capture and fission cross sections of plutonium-241. Nucl. Sci. Eng., 65:454-63, 1978.
- 92 WIGNER, E.P. & WILKINGS, J.E. Effect of the temperature of the moderator on the velocity distribution of neutrons with numerical calculations for hydrogen as moderator. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., 1948. (AECD-2275).
- 93 WILLIAMS, M.L. Validation of cell analysis capability using ENDF/B-V nuclear data - final report. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., 1986. (EPRI-NP-4806)
- 94 WILLIAMS, M.L.; WRIGHT, R.Q.; BARHEN, J. Improvements in EPRI-CELL methods and Benchmarking of the ENDF/B-V cross sections library. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., 1982. (EPRI-NP-2416)
- 95 WILLIAMS, M.L.; WRIGHT, R.Q.; WORLEY, B.A.; OZER, O.; EICH, W.J. Analysis of thermal reactor Benchmarks with design codes based on ENDF/B-V data. Nucl. Technol., 71:386-401, 1985.
- 96 WINDSOR, H. & GOLDSTEIN, R. Thermal reactor plutonium utilization analysis of lattices containing mixed-oxide fuel in particulate form. Trans. Am. Nucl. Soc., 15:107-8, 1971.
- 97 WRIGHT, R.Q. Resonance interference factor fitting procedure. Trans. Am. Nucl. Soc., 49:418-20, 1985.