



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS
DE RESSONÂNCIA NO FORMALISMO
DE MULTIGRUPO DE ENERGIA

ANDREA SANCHEZ

Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear - Reatores

Orientador:
Dr. Adimir dos Santos

São Paulo
1996

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

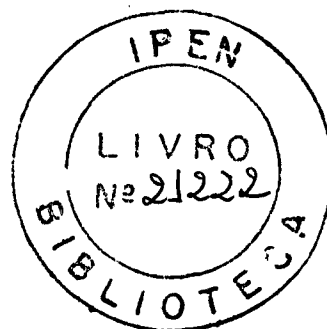
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**Determinação dos Parâmetros Intermediários de Ressonância no
Formalismo de Multigrupo de Energia**

Andrea Sanchez

Dissertação apresentada como requisito para a
obtenção do grau de Mestre em Ciências na Área
de Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia
do Combustível Nuclear.

Orientador: Dr. Adimir dos Santos



São Paulo

1996

Aos meus pais, Orlando e Claudete
e aos meus irmãos, Aretha e Nando,
pelo amor, dedicação, equilíbrio e
por tudo que representam para
mim....

AGRADECIMENTOS

Durante o desenvolvimento deste trabalho tive o apoio e incentivo de muitas pessoas e entidades. Gostaria de agradecer em especial:

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares da Comissão Nacional de Energia Nuclear (IPEN/CNEN-SP) pelos cursos ministrados e uso de suas instalações.

Ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento (CNPq) pelo auxílio financeiro durante todo o desenvolvimento do presente trabalho.

À diretoria da Usina de Angra I pela permissão da realização de estágio em suas instalações e devida orientação.

Ao Dr. Adimir dos Santos pela valiosa orientação, confiança e amizade desenvolvidos ao longo desses quase três anos de convívio.

Ao grande amigo Alfredo Abe pelas sugestões, apoio e incansável acompanhamento do trabalho realizado.

Ao amigo Mitsuo Yamaguchi pelo apoio e colaboração ao longo do trabalho.

Ao amigo Alexandre Caldeira (IEAv) pelo auxílio na utilização de códigos e grande apoio.

À amiga Cláudia C. Ghirardello pelo apoio e incentivo nas horas difíceis.

Aos amigos Walter, Toninho, Gaiandê, Cida, Elza, Renata, Gastão, Carlos Roberto, Júlio e Gelson pelo grande apoio e auxílio durante todos os anos de estreito convívio.

Finalmente, a todos aqueles, que direta ou indiretamente, prestaram sua colaboração no decorrer deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Durante o desenvolvimento deste trabalho tive o apoio e incentivo de muitas pessoas e entidades. Gostaria de agradecer em especial:

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares da Comissão Nacional de Energia Nuclear (IPEN/CNEN-SP) pelos cursos ministrados e uso de suas instalações.

Ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento (CNPq) pelo auxílio financeiro durante todo o desenvolvimento do presente trabalho.

À diretoria da Usina de Angra I pela permissão da realização de estágio em suas instalações e devida orientação.

Ao Dr. Adimir dos Santos pela valiosa orientação, confiança e amizade desenvolvidos ao longo desses quase três anos de convívio.

Ao grande amigo Alfredo Abe pelas sugestões, apoio e incansável acompanhamento do trabalho realizado.

Ao amigo Mitsuo Yamaguchi pelo apoio e colaboração ao longo do trabalho.

Ao amigo Alexandre Caldeira (IEAv) pelo auxílio na utilização de códigos e grande apoio.

À amiga Cláudia C. Ghirardello pelo apoio e incentivo nas horas difíceis.

Aos amigos Walter, Toninho, Gaiandê, Cida, Elza, Renata, Gastão, Carlos Roberto, Júlio e Gelson pelo grande apoio e auxílio durante todos os anos de estreito convívio.

Finalmente, a todos aqueles, que direta ou indiretamente, prestaram sua colaboração no decorrer deste trabalho.

DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE
RESSONÂNCIA NO FORMALISMO DE MULTIGRUPO DE
ENERGIA

ANDREA SANCHEZ

RESUMO

Nesse trabalho, propõem-se um método para obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo de energia. O método basicamente utiliza o procedimento comumente utilizado para a determinação desses parâmetros, mas introduz procedimentos numéricos para a solução das equações resultantes. As seções de choque e fluxo de nêutrons são obtidos pela utilização do sistema de pré-processamento de dados nucleares NJOY. Do ponto de vista analítico, o método proposto é o primeiro a utilizar o fluxo “exato” na obtenção desses parâmetros. Exemplos são mostrados tendo como nuclídeo absorvedor o urânio-238 (UO_2) imerso num meio moderador (H_2O). Os resultados obtidos, demonstram a validade do método proposto.

DETERMINATION OF INTERMEDIATE RESONANCE PARAMETER IN A MULTIGROUP ENERGY FORMALISM

ANDREA SANCHEZ

ABSTRACT

The objective of this work is to propose a method for the determination of the intermediate resonance parameters in the multigroup formalism. The method basically uses the mathematical procedure commonly used for the determination of these parameters, but introduces numerical approaches for the solution of the final equations. The cross sections and neutron flux are obtained from the pre-processing code NJOY. From the analytic point of view the proposed method is the first one to utilize the exact flux in the set of equations for the determination of the parameters. Examples are shown for uranium-238 (UO_2) as heavy absorber nuclide immerse in a moderator (H_2O). The results obtained demonstrate the validity of the proposed method.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

1.1 - ABSORÇÃO DE NÊUTRONS NA REGIÃO DE RESSONÂNCIAS	2
1.2 - MÉTODOS UTILIZADOS NA REGIÃO DE RESSONÂNCIA	3
1.3 - OS FATORES INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA	6
1.4 - HISTÓRICO	7
1.5 - OBJETIVO	11
1.6 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 1	12

CAPÍTULO 2 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 - DEFINIÇÃO DO PARÂMETRO INTERMEDIÁRIO DE RESSONÂNCIA	18
2.2 - FORMULAÇÃO ANALÍTICA PARA A OBTENÇÃO DOS FATORES INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA EM SISTEMAS HETEROGÊNEOS	21
2.3 - A APROXIMAÇÃO DE PRIMEIRA ORDEM PARA Φ_f	26
2.4 - O SISTEMA ACOPLADO DE EQUAÇÕES PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA	29
2.5 - O SISTEMA DE PRÉ-PROCESSAMENTO DE DADOS NUCLEARES NJOY E A COMPATIBILIZAÇÃO COM O EQUACIONAMENTO PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA	33
2.6 - COMPATIBILIZAÇÃO COM O PROCEDIMENTO DE GERAÇÃO DE SEÇÃO DE CHOQUE UTILIZANDO A OPÇÃO "FLUX CALCULATOR" DA SUBROTINA GENFLX DO CÓDIGO NJOY	40
2.7 - PROCEDIMENTOS COMUMENTE UTILIZADOS PARA A OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA	45
2.8 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA NO FORMALISMO DE MULTIGRUPO	48
2.9 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 2	50

CAPÍTULO 3 - PROCEDIMENTO COMPUTACIONAL

3.1 - INTRODUÇÃO	54
3.2 - OBTENÇÃO DO FLUXO E DAS SEÇÕES DE CHOQUE	57
3.3 - OBTENÇÃO DAS INTEGRAIS DE MODERAÇÃO	63
3.4 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 3	72

CAPÍTULO 4 - RESULTADOS OBTIDOS

4.1 - INTRODUÇÃO	74
4.2 - VERIFICAÇÃO DO PROCEDIMENTO PROPOSTO PARA O CÁLCULO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA	75
4.3 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA PELO PROGRAMA ELABORADO EM REGIÃO DE MULTIGRUPO DE ENERGIA	78
4.4 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA UTILIZANDO A SUBROTINA GENFLX	81
4.5 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 4	96

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

5.1 - CONCLUSÕES	98
5.2 - RECOMENDAÇÕES	101

ÍNDICE DE FIGURAS

FIGURA 1.1 - SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL DO URÂNIO-238 EM FUNÇÃO DA ENERGIA DO NÊUTRON NA REGIÃO DE RESSONÂNCIA	2
FIGURA 3.1.1 - FLUXOGRAMA DE CÁLCULO	56
FIGURA 3.2.1 - VARIAÇÃO DO FLUXO DE NÊUTRONS EM FUNÇÃO DA ENERGIA PARA A DILUIÇÃO DE $3.6E3$ BARNS, TEMPERATURA DE 1500 K E ENERGIA ENTRE 1 E 150 eV	60
FIGURA 3.2.2 - VARIAÇÃO DO FLUXO DE NÊUTRONS EM FUNÇÃO DA ENERGIA PARA A DILUIÇÃO DE $1.426E2$ BARNS, TEMPERATURA DE 1000 K E ENERGIA ENTRE 50 E 400 eV	61
FIGURA 3.2.3 - SOBREPOSIÇÃO DAS CURVAS DO FLUXO DE NÊUTRONS EM FUNÇÃO DA ENERGIA SEGUNDO A VARIAÇÃO DE TEMPERATURA	61
FIGURA 3.2.4 - VARIAÇÃO DO FLUXO DE NÊUTRONS EM FUNÇÃO DA ENERGIA PARA UMA DILUIÇÃO INFINITA	62
FIGURA 3.3.1 - DIAGRAMA DA ENERGIA	63
FIGURA 3.3.2 - $F(E)$ PARA O URÂNIO-238 CONSIDERANDO $\sigma_0 = 5.0$ BARNS E $T = 1500$ K	65

FIGURA 3.3.3 - F(E) PARA O URÂNIO-238 CONSIDERANDO $\sigma_0 = 65.34$ BARNS	
E T = 1500 K	66
FIGURA 3.3.4 - F(E) PARA O URÂNIO-238 CONSIDERANDO $\sigma_0 = 2.613E+02$ BARNS	
E T = 1500 K	66
FIGURA 3.3.5 - F(E) PARA O URÂNIO-238 CONSIDERANDO $\sigma_0 = 1E+10$ BARNS	
E T = 1500 K	67
FIGURA 3.3.6 - F(E) PARA O OXIGÊNIO CONSIDERANDO $\sigma_0 = 50.0$ BARNS	
E T = 1500 K	68
FIGURA 3.3.7 - F(E) PARA O OXIGÊNIO CONSIDERANDO $\sigma_0 = 200.0$ BARNS	
E T = 1500 K	69
FIGURA 3.3.8 - F(E) PARA O HIDROGÊNIO CONSIDERANDO $\sigma_0 = 50.0$ BARNS	
E T = 1500 K	70
FIGURA 3.3.9 - F(E) PARA O HIDROGÊNIO CONSIDERANDO $\sigma_0 = 200.0$ BARNS	
E T = 1500 K	70
FIGURA 4.3.1 - GRÁFICO DA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL DO URÂNIO-238 EM FUNÇÃO DA ENERGIA NO GRUPO 45	
	79
FIGURA 4.3.2 - GRÁFICO DA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL DO URÂNIO-238 EM FUNÇÃO DA ENERGIA NO GRUPO 32	
	80

FIGURA 4.4.1 - GRÁFICO DO PARÂMETRO κ EM FUNÇÃO DE σ_{01} COM VARIAÇÕES DE β PARA O GRUPO DE ENERGIA 32	93
FIGURA 4.4.2 - GRÁFICO DO PARÂMETRO κ EM FUNÇÃO DE σ_{01} COM VARIAÇÕES DE β PARA O GRUPO DE ENERGIA 45	93
FIGURA 4.4.3 - GRÁFICO DO PARÂMETRO μ EM FUNÇÃO DE σ_{01} COM VARIAÇÕES DE β PARA O GRUPO DE ENERGIA 32	94
FIGURA 4.4.4 - GRÁFICO DO PARÂMETRO μ EM FUNÇÃO DE σ_{01} COM VARIAÇÕES DE β PARA O GRUPO DE ENERGIA 45	94

ÍNDICE DE TABELAS

TABELA 4.2.1 - DADOS RELATIVOS DO URÂNIO-238	75
TABELA 4.2.2 - PARÂMETROS <i>IR</i> PARA A RESSONÂNCIA DE 192 eV A 0 K	76
TABELA 4.2.3 - DADOS PARA A RESSONÂNCIA DE 6.7 eV DO URÂNIO-238	77
TABELA 4.2.4 - PARÂMETROS <i>IR</i> PARA A RESSONÂNCIA DE 6.7 eV A 0 K	77
TABELA 4.3.1 - PARÂMETROS <i>IR</i> PARA OS GRUPOS 45 E 32	81
TABELA 4.4.1 - ESTRUTURA DOS GRUPOS DE ENERGIA	82
TABELA 4.4.2 - VALOR DAS INTEGRAIS REFERENTES À EQ.(2.6.14) PARA $\beta = 0.4$ E $T = 1500$ K	83
TABELA 4.4.3 - VALORES DAS INTEGRAIS DO FLUXO "EXATO" E DO FLUXO APROXIMADO PARA $\beta = 0.4$ E $T = 1500$ K	84
TABELA 4.4.4 - VALORES DE κ PARA O GRUPO 45	86
TABELA 4.4.5 - VALORES DE κ PARA O GRUPO 41	86
TABELA 4.4.6 - VALORES DE κ PARA O GRUPO 39	86
TABELA 4.4.7 - VALORES DE κ PARA O GRUPO 36	86

TABELA 4.4.8 - VALORES DE κ PARA O GRUPO 35	87
TABELA 4.4.9 - VALORES DE κ PARA O GRUPO 34	87
TABELA 4.4.10 - VALORES DE κ PARA O GRUPO 32	87
TABELA 4.4.11 - VALORES DE μ PARA O GRUPO 45	88
TABELA 4.4.12 - VALORES DE μ PARA O GRUPO 41	88
TABELA 4.4.13 - VALORES DE μ PARA O GRUPO 39	88
TABELA 4.4.14 - VALORES DE μ PARA O GRUPO 36	88
TABELA 4.4.15 - VALORES DE μ PARA O GRUPO 35	89
TABELA 4.4.16 - VALORES DE μ PARA O GRUPO 34	89
TABELA 4.4.17 - VALORES DE μ PARA O GRUPO 32	89
TABELA 4.4.18 - VALORES OBTIDOS PARA κ E μ PARA T = 1500 K VARIANDO-SE O VALOR DE β	91

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

1.1 - ABSORÇÃO DE NÊUTRONS NA REGIÃO DE RESSONÂNCIAS

1.2. - MÉTODOS UTILIZADOS NA REGIÃO DE RESSONÂNCIA

1.3 - OS FATORES INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

1.4 - HISTÓRICO

1.5 - OBJETIVO

1.6 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 1

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

1.1 - ABSORÇÃO DE NÊUTRONS NA REGIÃO DE RESSONÂNCIAS

Desde o projeto dos primeiros reatores nucleares, foi reconhecido que a região de ressonâncias dos nuclídeos actinídeos seria a mais difícil para tratar analiticamente como, também, para obter valores experimentais para servir de padrão de comparação. A região de energia do nêutron compreendida tipicamente entre 1 eV e 100 keV, é definida como sendo a “região de ressonâncias” e é a principal região onde há uma forte absorção de nêutrons por núcleos pesados. Um exemplo típico é o urânio-238 cuja seção de choque exibe ressonâncias pronunciadas nessa região. A Figura 1.1.1 ilustra as ressonâncias do urânio-238.

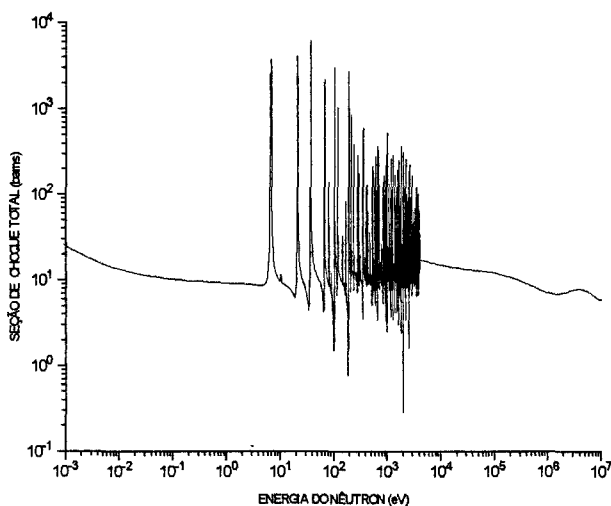


Figura 1.1.1 - Seção de choque total do urânio-238 em função da energia do nêutron na região de ressonâncias.

A dependência da seção de choque na energia do nêutron na região de ressonâncias exibe uma forma complexa evidenciando a dificuldade do tratamento do transporte de nêutrons nessa região de energia do nêutron. A região de ressonâncias é comumente tratada em duas categorias: região de ressonâncias resolvidas e região de ressonâncias não-resolvidas. Na região de ressonâncias resolvidas a dependência da seção de choque com a energia do nêutron é descrita através de formalismos tais como: Breit-Wigner¹, Adler-Adler² e Reich-Moore³ no qual os parâmetros de ressonância são conhecidos. Por outro lado, a região de ressonâncias não-resolvidas é caracterizada por uma superposição de ressonâncias fazendo com que a forma da seção de choque versus energia apresente-se suave, cujos valores representam médias sobre várias ressonâncias. Progressos recentes na área de avaliação de dados nucleares^{4,5} culminaram na extensão da região de ressonâncias resolvidas de vários núclídeos actínídeos para vários keV's.

A consequência da existência de ressonâncias é o efeito de autoblindagem⁶, que nada mais é do que a depressão do fluxo de nêutrons na região de ressonâncias. Outro efeito é o alargamento Doppler⁶ que está relacionado com a temperatura da pastilha combustível. Esses dois efeitos são de extrema importância no controle e segurança do reator.

O tratamento preciso do problema de absorção de nêutrons na região de ressonâncias envolve a solução da equação de transporte: uma equação integro-diferencial cuja solução em situações de interesse prático são difícilimas. Métodos aplicados na região de ressonâncias em geral se apoiam em simplificações do problema real.

1.2 - MÉTODOS UTILIZADOS NA REGIÃO DE RESSONÂNCIAS

Na área de reatores térmicos, que é o escopo desse trabalho, os métodos aplicados na região de ressonâncias podem ser classificados em três categorias:

1. Empírico;
2. Sofisticados;
3. Aproximados.

O método empírico é caracterizado pela utilização direta de resultados experimentais. Na década de 60, houve a realização de vários experimentos^{7,8,9} relacionados à taxa de absorção nas ressonâncias. Mais precisamente, foram obtidas experimentalmente a integral de ressonância do urânio-238 e do tório-232 em diversas situações tais como temperatura, razão de moderação e enriquecimento. Esses resultados foram sintetizados numa expressão empírica por Strawbridge¹⁰ e implementada em vários códigos como LEOPARD¹¹, LASER¹² e GAMTEC¹³. O método empírico se restringe ao intervalo das variáveis independentes (temperatura, razão de moderação, etc...) no qual foram elaborados os experimentos. Extrapolação para situações não previstas nos experimentos nem sempre é possível ou confiável. Dessa forma, a análise de novos combustíveis como MOX ou UO₂-ThO₂ ou reatores epitérmicos não são possíveis à partir do trabalho de Strawbridge.

Os métodos classificados como sofisticados englobam o método de Monte-Carlo¹⁴, probabilidade de colisão⁶ e o S_N como no OZMA¹⁵. O método de Monte-Carlo é um método estatístico no qual nêutrons são gerados aleatoriamente num espaço de fase e sua trajetória é determinada através de amostragem de números randômicos. Eventos como captura, fissão e espalhamento são também amostrados através de números randômicos. Dentre os métodos considerados sofisticados, o método de Monte-Carlo é o mais preciso, porque permite a modelagem explícita do sistema em estudo. As únicas limitações do método se restringem à qualidade da biblioteca de dados nucleares e ao número de histórias. Devido ao altíssimo tempo de CPU requerido para analisar um determinado sistema o método de Monte-Carlo raramente é utilizado em aplicações rotineiras mas sim, em situações onde precisão é fundamental, como no caso de validação de bibliotecas de dados nucleares.

O método de probabilidade de colisão é um método determinístico baseado na solução da equação integral de transporte. No caso específico da análise de absorção de nêutrons na região de ressonâncias, o método é aplicado à célula unitária onde o sistema é cilindrizado conservando a área total da célula. Assume-se espalhamento isotrópico com correção de transporte. A condição de reflexão especular (White Boundary Condition) é aplicada a superfície externa do problema. A equação integral de transporte é resolvida

para uma dada rede de pontos de energia e correspondente seções de choque assumindo fluxo assintótico acima da região de ressonância. Como não há “upscattering” nessa região de energia do nêutron a solução para o fluxo de nêutrons é feita sequencialmente desde a energia máxima até o limite da região térmica. Após a obtenção do fluxo de nêutrons, as taxas de reação e, conseqüentemente, as seções de choque de grupo são obtidas imediatamente.

O código OZMA também se apoia na solução da equação integral de transporte, mas possui a opção S_N o que permite altas ordens de anisotropia e a solução é obtida para o fluxo angular. Similarmente são feitas as mesmas considerações para a geometria e intervalo de energia de aplicação do método.

Em termos de métodos aproximados destacam-se os métodos de Nordheim¹⁶ e Bondarenko¹⁷. O método de Nordheim é um método aproximado que consiste em resolver iterativamente a equação de moderação de nêutrons considerando as absorções parciais e recalculando o fluxo depressionado. O sistema celular heterogêneo é transformado num homogêneo através do uso da aproximação racional de Wigner¹ para a probabilidade de escape do combustível corrigida pelo fator de Bell⁶ e do teorema da reciprocidade. Esse método encontra-se implementado no código HAMMER-TECHNION¹⁸, atualmente utilizado na Divisão de Física de Reatores do IPEN/CNEN-SP. A resolução da equação de moderação por esse método torna o código razoavelmente lento, mostrando uma desvantagem no ponto de vista computacional. Além disso, as ressonâncias devem ser descritas pelo formalismo Single-Level Breit-Wigner¹, o que torna difícil a utilização das novas bibliotecas ENDF/B-VI⁴ e JENDL 3.1⁵.

Por outro lado, o método de Bondarenko tem-se mostrado rápido e eficiente no que tange ao processamento computacional e, códigos mais recentes^{19,20,21}, têm-se utilizado o método para o tratamento da autoblindagem das ressonâncias resolvidas. Apesar de inicialmente ser desenvolvido para utilização em reatores rápidos, esse método foi estendido a cálculos de reatores térmicos e epitérmicos através do método SFM (Shielding Factor Method)²². No método de Bondarenko o fluxo utilizado como função ponderação é parametrizado através de duas variáveis: seção de choque de diluição (σ_0) e a temperatura

(T). Desta forma, a seção de choque efetiva no formalismo de multigrupo dependerá, somente, de dois parâmetros (σ_0) e (T). Na aplicação do método de Bondarenko a um problema específico, interpola-se as seções de choque na temperatura (T) e na diluição (σ_0) da aplicação. No método de Bondarenko não há nenhuma restrição ao formalismo utilizado para descrever as ressonâncias.

Para que esse método tenha sucesso em comparação com métodos mais sofisticados¹⁴, é necessário a obtenção dos fatores intermediários de ressonância²³ apropriados a cada nuclídeo e a cada multigrupo.

1.3 - OS FATORES INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

Os métodos aproximados como Nordheim e Bondarenko, se apoiam no princípio da equivalência entre sistemas heterogêneos e homogêneos⁶. Essa equivalência é obtida assumindo sistemas com duas regiões: combustível e moderador, espalhamento isotrópico no centro de massa, aproximação racional¹ para a probabilidade de escape do combustível, o teorema da reciprocidade⁶ e a hipótese de que as ressonâncias do absorvedor sejam estreitas (aproximação NR) em relação à perda média de energia do nêutron no moderador externo. Com essas hipóteses pode-se desacoplar o sistema de equações para o combustível e moderador e o problema reduz-se a solução da equação do fluxo para a região do combustível somente. A hipótese da utilização da aproximação NR para o moderador externo é restritiva e pode ser evitada utilizando-se procedimentos menos restritivos como os parâmetros intermediários de ressonância²⁴. Os parâmetros intermediários de ressonância são definidos tal que a integral de moderação recaia entre os limites extremos NR (Narrow Resonance) e WR (Wide Resonance). Nesse caso preserva-se o teorema da equivalência e o moderador externo é tratado de uma maneira mais precisa.

O exemplo mencionado refere-se ao moderador externo. Entretanto, o procedimento pode ser estendido a qualquer nuclídeo do sistema. Nos cálculos habituais de

células unitárias, os núclídeos normalmente considerados para serem tratados com o formalismo intermediário de ressonância são: o oxigênio no UO_2 , o moderador externo que na grande maioria dos casos é o hidrogênio e núclídeos pesados como urânio-235, plutônio-239, etc.... As ressonâncias a serem consideradas, pertencem ao núclídeo absorvedor no sistema para o qual as equações de moderação estão sendo resolvidas. Nos métodos de Nordheim e Bondarenko não existe a possibilidade de interferência entre ressonâncias de núclídeos distintos, visto que, estas são consideradas isoladas. Portanto, os parâmetros intermediários de ressonância são considerados em relação às ressonâncias do núclídeo absorvedor. Grande ênfase é colocada nesse caso nos núclídeos que dominam o espectro epitérmico como o urânio-238 em reatores PWR.

Finalizando, tem-se que obter os parâmetros intermediários de ressonância para cada núclídeo e para cada grupo, o que em princípio acarreta complicações, pois, um determinado grupo pode conter frações de ressonância ou várias ressonâncias. Esse aspecto é de grande importância para obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância e será objeto de análise desse trabalho.

1.4 - HISTÓRICO

Um grande número de soluções aproximadas foram propostas para a solução de equações expressando o efeito de “slowing down” de nêutrons de modo a diminuir-se a dificuldade para a obtenção de soluções analíticas exatas. Exemplos característicos são as soluções de primeira ordem obtidas pelas aproximações²⁵ “narrow-resonance” (NR) e “wide-resonance” (WR) que utilizam o parâmetro de largura prática introduzido por Wigner²⁶.

Os parâmetros intermediários de ressonância foram introduzidos por Goldstein e Cohen²⁴ em 1962, para tratar situações nas quais as ressonâncias fossem intermediárias entre NR e WR para um dado núclídeo espalhador. O método introduz um parâmetro

(parâmetro intermediário de ressonância) para representar as características das situações intermediárias, incluindo as condições de fronteiras delimitadas pelos limites NR e WR.

Desde então, foram propostos vários métodos alternativos^{24,27-31} para determinar os parâmetros intermediários de ressonância, incluindo a generalização²⁷ para vários espalhadores. O método iterativo de Goldstein e Cohen^{24,27} foi o mais simples e mais comumente usado. Esse método permite a aplicação da aproximação intermediária de ressonância também para sistemas heterogêneos^{32,33} e os resultados dos cálculos da integral de ressonância mostraram boa concordância com os cálculos de Monte Carlo. Entretanto, esse tratamento não inclui o efeito da interferência entre espalhamento ressonante e potencial. Partindo da suposição da aproximação NR para o espalhamento do moderador (sistema moderado NR), Goldstein e Cohen³⁴ estenderam a formulação para incluir a interferência de espalhamento. Nesse caso, entretanto, seu método tornou-se tão complicado que a generalização para sistemas heterogêneos incluindo moderadores não-NR é quase impossível.

Alternativamente, um outro método foi proposto por Ishiguro³⁵ para determinar os parâmetros intermediários de ressonância com a presença da interferência de espalhamento. Foi mostrado que a interferência de espalhamento é bastante importante para ressonâncias com seções de choque apreciáveis. Esse método serviu como base para a derivação de um procedimento simples e conveniente para a aproximação, e mostrou-se como uma extensão de métodos anteriores^{24,27,28,34}. Foi mostrado, também, que os parâmetros intermediários de ressonância para o absorvedor nem sempre estão entre 0 e 1 se a interferência de espalhamento for considerada³⁶.

Os métodos mencionados até então somente consideraram sistemas com temperatura zero. O efeito da temperatura nos parâmetros intermediários de ressonância, foi considerado por McKay³⁷ e Sehgal³¹. Foi concluído que os parâmetros intermediários de ressonância para temperatura zero podem ser usados com boa precisão para obter absorção em ressonâncias para temperaturas diferentes de zero, exceto em casos com moderadores pesados e ressonâncias amplas. Esse tratamento foi totalmente analítico.

Em 1969, Ishiguro³⁸ propôs um método para considerar o efeito das variações de temperatura nos parâmetros intermediários de ressonância onde esses parâmetros foram calculados pela solução numérica da equação de “slowing -down” de nêutrons incluindo a seção de choque de alargamento Doppler em sistemas homogêneos. Foi mostrado que, a dependência dos parâmetros intermediários de ressonância na temperatura é bastante importante para ressonâncias com uma apreciável interferência de espalhamento.

A formulação intermediária de ressonância foi estendida por Goldstein³⁹ para o caso da dependência da temperatura obtendo uma expressão explícita para os parâmetros intermediários de ressonância em função da temperatura. Utiliza-se a função J tabelada. A integral de ressonância é obtida em termos dos parâmetros intermediários de ressonância dependentes da temperatura e representa a completa generalização da formulação intermediária de ressonância para o caso da dependência na temperatura. As soluções obtidas são similares à forma analítica das soluções de temperatura zero e no limite quando a temperatura tende a zero obtém-se o caso correspondente.

Um aperfeiçoamento do procedimento foi proposto por Chiovato⁴⁰, o qual incorporou desenvolvimentos efetuados nos trabalhos anteriores e introduziu modificações que melhoraram esses procedimentos. Os resultados obtidos mostram que o formalismo de ressonância nesse trabalho oferece vantagens consideráveis no método de Nordheim: melhor precisão na obtenção das seções de choque de absorção das ressonâncias e tempos de processamento menores. O método proposto, foi introduzido no código GGC para a obtenção de seções de choque de multigrupo em células quadradas de varetas de UO_2 e água leve como moderador (H_2O). Os desvios encontrados para a integral de ressonância quando comparados com o código de Monte Carlo REPETITIOUS⁴¹ mostram que existe uma tendência com o raio da vareta. Quanto maior o raio, maior o desvio existente para a integral de ressonância.

Baseado num método de mínimos quadrados, Aldous⁴² introduziu um método para o cálculo dos parâmetros intermediários de ressonância. Sua análise foi efetuada para sistemas homogêneos; ou seja, o moderador externo considerado espalhador NR. Aldous foi o primeiro a obter parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de

multigrupo. Entretanto sua análise restringiu-se ao moderador interno. Alternativamente, foi obtido o parâmetro intermediário de ressonância efetivo de um grupo, o qual foi parametrizado em função do número de massa.

Um aperfeiçoamento nos métodos de cálculo dos parâmetros intermediários de ressonância considerando sistemas heterogêneos, interferência de espalhamento e interferência da temperatura, foi proposto por Mizuta e Yamamoto⁴³, em 1984. São dados exemplos de aplicações em função da temperatura para varetas de UO_2 imersas num meio moderador (H_2O). Pode-se observar que os resultados obtidos para a integral de ressonância dependentes da temperatura, apresentam boa concordância com métodos mais sofisticados como Monte Carlo. Além disso, também foi observada a extrema dificuldade para obter o parâmetro intermediário de ressonância para o absorvedor (λ) e que esse parâmetro exibe valores negativos e também acima de 1.0.

No que tange aos códigos celulares, o código EPRI-CELL⁴⁴ foi modificado em 1983 para utilizar parâmetros intermediários de ressonância dependentes da energia. Os parâmetros intermediários de ressonância provieram do código CPM⁴⁵, cujos procedimentos de obtenção não estão disponíveis na literatura, embora haja sugestões para obtê-los usando mínimos quadrados.

Finalizando, a título de utilização dos parâmetros intermediários de ressonância menciona-se o WLUP (WIMS Library Update Project)⁴⁶ cujo objetivo é atualizar a biblioteca do WIMS utilizando avaliações de dados nucleares mais recentes como ENDF/B-VI⁴.

1.5 - OBJETIVO

O propósito desse trabalho é apresentar um procedimento para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupos de energia. O procedimento proposto não impõe nenhuma restrição ao formalismo utilizado para descrever as ressonâncias e necessita somente de seções de choque obtidas por um código de pré-processamento de dados nucleares. Serão gerados parâmetros intermediários de ressonância para serem utilizados como o programa HAMBOND⁴⁷, uma versão do HAMMER-TECHNION com formalismo de Bondarenko.

1.6 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 1

- 1 - Breit, G. and Wigner, E.P., Capture of Slow Neutrons, Phys. Rev., 49, 519 (1936).
- 2 - Adler, F.T. and Adler, D.B., Conf. on Neutron Cross Section Technology, Vol II, 873 (1967).
- 3 - Reich, C.W. and Moore, Multilevel Formula for the Fission Process., Phys. Rev. 111, 929 (1968).
- 4 - Lemmel, H. D., ENDF B-VI, The U. S. Evaluated Nuclear Data Library for Neutron Reaction Data, IAEA-NDS-100, June (1990).
- 5 - Shibata, K., et alli, Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 - JENDL-3, JAERI - 1319 (1990).
- 6 - Bell, G. I. and Glasstone, S., Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand Reinhold Company, New York (1970).
- 7 - Allan, C.G., et alli, Resonance Absorption of Uranium in Mixtures, CP-1676 (A-2412), Indiana University (1944).
- 8 - Richtmyer, R.D., Monte Carlo Study of Resonance Escape in Hexagonal Reactor Lattices, NYO-6479, New York University (1955).
- 9 - Grob, V.E. and Davidson, P.W., et alli, Multi-Region Reactor Lattice Studies-Results of Critical Experiments in Loose Lattices of UO₂ Rods in H₂O, WCAP-1412, Westinghouse Atomic Power Division (1960).
- 10 - Strawbridge, L.W. and Barry, R.F., Criticality Calculations for Uniform Water-Moderated Lattices, Nucl.Sci.Eng. 23, 58 (1965).

- 11 - Barry, R.F., LEOPARD - A Spectrum Dependent Non-Spatial Depletion Code for the IBM-7094, Atomic Power Division, Westinghouse Electric Corp., WCAP-3269-26, Sept. 1963.
- 12 - Poncelet, C.G., LASER: A Depletion Program for Lattice Calculation based of MUFT and THERMOS, Pittsburg, PA, Westinghouse Electric Corp., WCAP-6073 (1966).
- 13 - Carter, L.L., et alli, GAMTEC-II: A Code for Generating Consistent Multigroup Constants Utilized in Diffusion and Transport Theory Calculations, Pacific Northwest Laboratory, Richland, Washington, BNWL-35 (March-1965).
- 14 - Briesmeister, J. F., MCNP - A General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport - Version 3A. LA-7396-M. Los Alamos National Laboratory, USA.
- 15 - Barhen, J. and Rothenstein, W., Report EPRI NP-926, (1981).
- 16 - Nordheim, L. W., A New Calculation of Resonance Integrals, Nucl. Sci. Eng., 12, 457 (1962).
- 17 - Bondarenko, J. J., Ed. Group Constants for Nuclear Reactor Calculations, Consultants Bureau, New York (1964).
- 18 - Barhein, J., Rothenstein, W. and Taviv, E., The HAMMER Code System, Technion Israel Institute of Technology, Haifa Israel, NP-565 Oct. (1978).
- 19 - Hoffman, A., et ali, - APOLLO: Code multigroup de resolution de l'equation du transport pour les neutron, CEA-n-1610.
- 20 - Tsuchihashi, K., Takano, H., Horikami, K. and Ishiguro, Y., SRAC: JAERI Thermal Reactor Standard Code System for Reactor Design and Analysis, JAERI-1285, Japan Atomic Energy Research Institute (1983).

- 21** - Yamamoto, M., Sakurada, K., Mizuta, H. and Makino, K., Validation of the HELIOS.HX Code for High Conversion Light Water Reactor Lattice Analysis, Nuclear Technology, *80*, p.240-249, Febv. (1988).
- 22** - Williams, M.L., Correction of Multigroup Cross Sections for Resolved Resonance Interference in Mixed Absorbers, Nucl. Sci. Eng., *83*, 37 (1983).
- 23** - Goldstein, R. and Brooks, H., Intermediate Resonance Absorption in Nonhomogeneous System, Nucl. Sci. Eng., *20*, 331 (1964).
- 24** - Goldstein, R. and Cohen, E.R., Theory of Resonance Absorption of Neutrons, Nuclear Sci. and Eng., *13*, 132 (1962).
- 25** - Dresner, L., Resonance Absorption in Nuclear Reactors, Pergamon Press, Inc, (1960)
- 26** - Wigner, E.P., et alli, Resonance Absorption of Neutrons by Spheres, J. Appl. Phys., *26*, 260 (1955).
- 27** - Goldstein, R., Intermediate Resonance Absorption at Low Energies, Nucl. Sci. Eng., *22*, 387 (1965).
- 28** - Goldstein, R., Intermediate Resonance Absorption for Multi-Nuclide Systems, Nucl. Sci. Eng., *30*, 304 (1967).
- 29** - Dyos, M. W. and Keane, A., Iterative Solution of the Neutron Slowing Down Equation, Nucl. Sci. Eng., *26*, 530 (1966).
- 30** - Pomraning, G.C., Dyos, M.W., An Analytic Treatment of the "Flux Bump" in Resonance Absorption, Nucl. Sci. Eng., *27*, 137 (1967).
- 31** - Sehgal, B.R., Resonance Absorption for Heavy Moderators in Homogeneous Media, Journal Nucl. Energy, A/B, *19*, 921 (1965).

- 32 - Sehgal, B. R. and Goldstein, R., Intermediate Resonance Absorption in Heterogeneous Media, Nucl. Sci. Eng., 25, 174 (1966).
- 33 - Ishiguro, Y. and Takano, H., Intermediate Neutron Resonance Absorption in Heterogeneous Systems, Nucl. Sci. Eng., 31, 388 (1968).
- 34 - Goldstein, R. and Cohen, E.R., Theory of Resonance Absorption of Neutrons II, Trans. Amer. Nucl. Society, 5, 56 (1962).
- 35 - Ishiguro, Y., Exact Treatment of the Resonance Absorption of Neutrons of Intermediate Energy, Journal Nucl. Sci. Technol., 32, 422 (1968).
- 36 - Ishiguro, Y., On the Permissible Range for Parameter used in Intermediate-Resonance Treatment, Journal Nucl. Sci. Technol., 5/5], 255 (1968).
- 37 - McKay, M. H. and Pollard, J. P., Effect of Temperature Variation on "Intermediate-Resonance" Formulas, Nucl. Sci. Eng., 16, 243 (1963).
- 38 - Ishiguro, Y., Inoue, S. and Takano, H., Temperature Dependence of Parameters Used in Intermediate Treatment of Resonance Absorption, Journal Nucl. Sci. Technol, 6/6/ 308 (1969).
- 39 - Goldstein, R., Temperature-Dependent Intermediate Neutron Resonance Integrals, Nucl. Sci. Eng., 48, 248 (1972).
- 40 - Chiovato, O., Corno, S. and Pasquantonio, F.Di, An Improved Intermediate Resonance Method for Heterogeneous Media, Annals of Nuclear Energy, 4, 91 (1977).
- 41 - Levine, M.M., Resonance Integral Calculation for U-238 Lattices, Nucl. Sci. Eng., 16, 271 (1963).

- 42 - Aldous, A.C., Numerical Studies of the Hydrogen Equivalent of some Structural Materials in their Effect on U-238 Resonance Capture, General Reactor Physics Division, Atomic Energy Establishment, Winfrith, Dorchester, Dorset, (1969).
- 43 - [17] Mizuta, H. and Yamamoto, M., Improved Intermediate Resonance Approximation in Heterogeneous System, Journal Nucl. Sci. Technol., 21/3], 161 (1984).
- 44 - [46] - Williams, M.L., Wright, R.Q., Barhen, J., Rothenstein, W. and Toney, B., Benchmarking of Epithermal Methods in the Lattice Physics Code EPRI-CELL, Proceedings: Thermal Reactor Benchmark Calculations, Techniques, Results, and Applications, Brookhaven National Lab., Upton, NY(USA), (Feb. 1983).
- 45 - Advanced Recycle Methodology Program System Documentation, EPRI-CCM-3, RP118-1, Part II, Chapter 6, (November 1975).
- 46 - Ganesan, S., Update of the WIMS-D4 Nuclear Data Library, IAEA Nuclear Data Section, Wagramerstrasse 5, A-1400 Viena, (1993).
- 47 - Abe, A. Y. e Santos, A., Implementação do Método de Bondarenko para o Tratamento da Autoblindagem do Código HAMMER-TECHNION, Anais do IX ENFIR - Caxambú, M.G., Outubro (1993).

CAPÍTULO 2 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 - DEFINIÇÃO DO PARÂMETRO INTERMEDIÁRIO DE RESSONÂNCIA

2.2 - FORMULAÇÃO ANALÍTICA PARA A OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA EM SISTEMAS HETEROGÊNEOS

2.3 - A APROXIMAÇÃO DE PRIMEIRA ORDEM PARA Φ_f

2.4 - O SISTEMA ACOPLADO DE EQUAÇÕES PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

2.5 - O SISTEMA DE PRÉ-PROCESSAMENTO DE DADOS NUCLEARES NJOY E A COMPATIBILIZAÇÃO COM O EQUACIONAMENTO PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

2.6 - COMPATIBILIZAÇÃO COM O PROCEDIMENTO DE GERAÇÃO DE SEÇÃO DE CHOQUE UTILIZANDO A OPÇÃO “FLUX CALCULATOR” DA SUBROTINA GENFLX DO CÓDIGO NJOY

2.7 - PROCEDIMENTOS COMUMENTE UTILIZADOS PARA A OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

2.8 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA NO FORMALISMO DE MULTIGRUPO

2.9 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 2

CAPÍTULO 2 - FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 - DEFINIÇÃO DO PARÂMETRO INTERMEDIÁRIO DE RESSONÂNCIA

O tratamento de autoblindagem das ressonâncias segue aproximações como: a aproximação de ressonância estreita (NR) ou a aproximação de ressonância larga (WR), que envolvem o conceito de ressonâncias isoladas que sejam descritas pela largura prática (Γ_p) e utilizam o formalismo de Breit-Wigner¹. O conceito de ressonâncias intermediárias foi introduzido por Goldstein² através dos fatores intermediários de ressonância.

Os fatores intermediários de ressonância (fatores IR) são definidos da seguinte forma: considere um meio infinito composto por um nuclídeo absorvedor pesado cuja seção de choque microscópica total e de espalhamento elástico seja representada por σ_t e σ_s , respectivamente, e a contribuição dos demais nuclídeos espalhadores representada por σ_0 em barns por átomo absorvedor conforme amplamente discutido nas referências 3,4. A equação de balanço para o fluxo de nêutrons assumindo espalhamento isotrópico no centro de massa pode ser escrita como

$$[\sigma_t(E) + \sigma_0] \Phi(E) = \int_E^{E/\alpha} \frac{\sigma_s(E') \Phi(E')}{(1-\alpha)} \cdot \frac{dE'}{E'} + \frac{\sigma_0}{E}, \quad (2.1.1)$$

onde

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1} \right)^2,$$

e A é o número de massa do nuclídeo absorvedor.

Se for considerada a região de energia do nêutron de uma ressonância específica, pode-se afirmar que, se a ressonância for considerada estreita (NR), ou seja, se a largura prática da ressonância for muito menor que a perda de energia média por colisão no material absorvedor, tem-se⁴

$$\int_E^{E/\alpha} \frac{\sigma_s(E')\Phi(E')}{(1-\alpha)} \cdot \frac{dE'}{E'} = \frac{\sigma_p}{E}, \quad (2.1.2)$$

onde

- σ_p é a seção de choque potencial microscópica por átomo absorvedor.

De outra forma, se a ressonância for considerada larga (WR), ou seja, se a largura prática da ressonância for muito maior que a perda de energia média por colisão no material absorvedor, tem-se⁴

$$\int_E^{E/\alpha} \frac{\sigma_s(E')\Phi(E')}{(1-\alpha)} \cdot \frac{dE'}{E'} = \sigma_s(E)\Phi(E). \quad (2.1.3)$$

Introduz-se, então, o fator intermediário de ressonância (λ) da seguinte forma

$$\int_E^{E/\alpha} \frac{\sigma_S(E')\Phi(E')}{(1-\alpha)} \cdot \frac{dE'}{E'} = \lambda \frac{\sigma_P}{E} + (1-\lambda)\sigma_S(E)\Phi(E), \quad (2.1.4)$$

onde λ é uma constante.

Quando $\lambda = 1$, reproduz-se a aproximação NR e quando $\lambda = 0$, tem-se a aproximação WR. Casos intermediários são representados por um valor de λ entre 0 e 1.

A proposta desse método é preservar a forma analítica de função ponderação $\Phi(E)$ como se fosse um caso intermediário entre NR e WR mas, com a seção de choque de espalhamento modificada pelo fator λ . Substituindo a equação (2.1.4) em (2.1.1) tem-se

$$\Phi_{IR}(E) = \frac{\sigma_0 + \lambda\sigma_P}{\sigma_t - (1-\lambda)\sigma_s(E) + \sigma_0} \cdot \frac{1}{E}. \quad (2.1.5)$$

Nesta definição deve ser observado que λ representa o fator intermediário de ressonância genérico, porém nas próximas seções λ representará o fator IR para o átomo absorvedor, um outro fator intermediário de ressonância, κ , representará o moderador presente no meio absorvedor e μ , representará o fator intermediário de ressonância para o moderador externo.

2.2 - FORMULAÇÃO ANALÍTICA PARA A OBTENÇÃO DOS FATORES INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA EM SISTEMAS HETEROGÊNEOS

Para calcular os parâmetros intermediários de ressonância num sistema heterogêneo deve-se, antes de tudo, obter-se uma expressão confiável para o fluxo de nêutrons. Admite-se, primeiramente, o sistema descrito em termos de probabilidade de colisão em duas regiões consistindo da região absorvedora (combustível mais moderador) e da região moderadora, representadas pelos índices subscritos f para o combustível, am para o moderador da mistura absorvedora e m para o moderador externo, e determinado pelas equações de balanço de nêutrons⁵, dadas por

$$\sigma_t(E)\Phi_f(E) = [1 - P_f(E)] \left\{ K_f(\sigma_S \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) \right\} + P_m(E) s_m K_m(\Phi_m), \quad (2.2.1)$$

que representa o balanço de nêutrons no meio absorvedor, e

$$s_m \Phi_m(E) = P_f(E) \left\{ K_f(\sigma_S \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) \right\} + [1 - P_m(E)] s_m K_m(\Phi_m), \quad (2.2.2)$$

que expressa o balanço de nêutrons na região do moderador. As equações (2.2.1) e (2.2.2) assumem a presença de um único nuclídeo absorvedor com ressonâncias na região combustível com um átomo moderador ligado e um único moderador externo (Hidrogênio da água). A generalização para vários nuclídeos junto ao combustível como no moderador constitui um sistema complicadíssimo de equações que só pode ser resolvida assumindo aproximações. O operador K_j das equações (2.2.1) e (2.2.2), representa a fonte de moderação de nêutrons devido ao espalhamento elástico, assumindo espalhamento isotrópico no centro de massa, pelo nuclídeo j e, é definido por

$$K_j(\varphi) = \int_E^{E/\alpha_j} \frac{\varphi(E') dE'}{(1 - \alpha_j) E'} \quad \text{Eq.(2.2.3)}$$

Onde $\varphi(E')$ pode representar o fluxo de nêutrons $\Phi_f(E')$ ou $\Phi_m(E')$, ou ainda, o produto da seção de choque $\sigma_s(E')$ pelo fluxo ($\Phi_f(E')$ ou $\Phi_m(E')$). Nas equações (2.2.1) e (2.2.2), σ_t é a seção de choque microscópica total da mistura, absorvedor mais moderador, por átomo absorvedor, e é dada por

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a + \sigma_{am}, \quad (2.2.4)$$

- σ_s é a seção de choque microscópica de espalhamento elástico por átomo absorvedor do combustível;

- σ_a é a seção de choque microscópica de absorção da mistura absorvedora por átomo absorvedor;

- σ_{am} é a seção de choque microscópica de espalhamento elástico do moderador da mistura absorvedora por átomo absorvedor.

Definindo-se s_m como:

$$s_m = \Sigma_m V_m / N_r V_f, \quad (2.2.5)$$

onde, Σ_m é a seção de choque macroscópica total para o moderador externo, V_m e V_f são, respectivamente, volume do moderador e volume do combustível e N_r é a densidade atômica do material absorvedor.

E $P_f(E)$ e $P_m(E)$ são, respectivamente, as probabilidades de escape de nêutrons do combustível e do moderador⁵.

As equações (2.2.1) e (2.2.2) representam um sistema acoplado de equações integrais para $\Phi_f(E)$ e $\Phi_m(E)$. Soluções analíticas são difícilimas. Para desacoplar esse sistema de equações considere o procedimento comumente utilizado descrito a seguir.

Partindo-se das equações (2.2.1) e (2.2.2) e assumindo-se a Aproximação Racional de Wigner⁶ para a probabilidade de escape do combustível corrigida pela introdução do fator de Bell⁶, \bar{A}_s , dada por

$$P_f(E) = \frac{\bar{A}_s}{\sigma_t(E) + \bar{A}_s}, \quad (2.2.6)$$

onde \bar{A}_s representa a seção de choque de escape do sistema, e a relação da reciprocidade⁶,

$$\sigma_t(E) \cdot P_f(E) = s_m P_m(E). \quad (2.2.7)$$

Substituindo-se as equações (2.2.6) e (2.2.7) na equação (2.2.1), tem-se

$$\sigma_t(E)\Phi_f(E) = \left[1 - \frac{\bar{A}_s}{\sigma_t(E) + \bar{A}_s} \right] \left[K_f(\sigma_s\Phi_f) - \sigma_{am}K_{am}(\Phi_f) \right] + \sigma_f \frac{\bar{A}_s}{\sigma_t(E) + \bar{A}_s} K_m(\Phi_m), \quad (2.2.8)$$

multiplicando por $\sigma_t(E) + \bar{A}_s$, tem-se

$$(\sigma_t(E) + \bar{A}_s)\sigma_t(E)\Phi_f(E) = \left[(\sigma_t(E) + \bar{A}_s) - \bar{A}_s \right] \cdot \left[K_f(\sigma_s\Phi_f) + \sigma_{am}K_{am}(\Phi_f) \right] + \sigma_f \bar{A}_s K_m(\Phi_m) \quad (2.2.9)$$

e, portanto

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \sigma_t(E) \Phi_f(E) = \sigma_t [K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f)] + \sigma_t [\bar{A}s K_m(\Phi_m)] \quad (2.2.10)$$

Cancelando-se σ_t em ambos os lados da equação (2.2.10) pode-se escrever a Eq.(2.2.1) como

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) + \bar{A}s K_m(\Phi_m). \quad (2.2.11)$$

Utilizando agora um processo análogo para a equação (2.2.2), tem-se

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_m(E) = \frac{\bar{A}s}{s_m} \{K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f)\} + \left\{ [\sigma_t(E) + \bar{A}s] - \frac{\sigma_t \bar{A}s}{s_m} \right\} K_m(\Phi_m) \quad (2.2.12)$$

Partindo da equação (2.2.11) do combustível e isolando-se os termos K_f e K_{am} , tem-se

$$K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) = [\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_f(E) - \bar{A}s K_m(\Phi_m), \quad (2.2.13)$$

e substituindo-se a equação (2.2.13) na equação (2.2.12), do moderador tem-se, então

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_m(E) = \frac{\bar{A}s}{s_m} \{[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_f(E) - \bar{A}s K_m(\Phi_m)\} + \left\{ [\sigma_t(E) + \bar{A}s] - \frac{\bar{A}s}{s_m} \sigma_t(E) \right\} K_m(\Phi_m) \quad (2.2.14)$$

Introduzindo-se o parâmetro intermediário de ressonância, do moderador externo, dado por μ^5 , definido como

$$K_m(\Phi_m) = \frac{\mu}{E} + (1 - \mu)\Phi_m(E) \quad (2.2.15)$$

Substituindo a equação (2.2.15) na equação (2.2.14), cancelando-se os termos iguais e agrupando-se Φ_f , Φ_m e μ , tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\bar{A}s}{s_m}(\sigma_t(E) + \bar{A}s)\Phi_f(E) + \left[(\sigma_t(E) + \bar{A}s) - \frac{\bar{A}^2 s^2}{s_m} - \frac{\bar{A}s}{s_m} \sigma_t \right] \frac{\mu}{E} + \\ + \left[-\frac{\bar{A}^2 s^2}{s_m}(1 - \mu) - \mu(\sigma_t(E) + \bar{A}s) - \frac{\bar{A}s}{s_m} \sigma_t(1 - \mu) \right] \Phi_m(E) = 0 \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

Manipulando-se os termos que multiplicam μ e Φ_m , tem-se

$$\Phi_m(E) = Q\Phi_f(E) + \frac{Q\mu}{E} \left(\frac{1}{\bar{A}s/s_m} - 1 \right), \quad (2.2.17)$$

onde Q é dado por

$$Q = \frac{\bar{A}s}{s_m} \frac{1}{\mu + (1 - \mu) \frac{\bar{A}s}{s_m}}, \quad (2.2.18)$$

e Φ_m para $\mu = 1$ (aproximação de primeira ordem) é dado por

$$\Phi_m^{(1)}(E) = \frac{1}{E} - Q \left(\frac{1}{E} - \Phi_f(E) \right) \quad (2.2.19)$$

Utilizando-se a equação (2.2.19) na equação (2.2.15) e substituindo-se o resultado na equação (2.2.11) desacopla-se o sistema de equações (2.2.1) e (2.2.2) e tem-se

$$\left\{ \sigma_t(E) + \bar{A}s[1-Q(1-\mu)] \right\} \Phi_f(E) = K_f(\sigma_S \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) + \left\{ [1-Q(1-\mu)] \bar{A}s \right\} / E, \quad (2.2.20)$$

uma equação cuja única incógnita é $\Phi_f(E)$.

A equação (2.2.20) representa uma expressão matemática para o teorema da equivalência entre sistemas heterogêneo e homogêneo. Conforme amplamente discutido em vários livros textos^{6,7,8}, sistemas homogêneos e heterogêneos são equivalentes; ou seja, as integrais de ressonância são iguais, desde que o termo $\bar{A}s[1-Q(1-\mu)]$ seja igual à seção de choque potencial do nuclídeo absorvedor no sistema homogêneo. Essa afirmação corresponde ao teorema de equivalência e, será o ponto de partida para o detalhamento matemático dos fatores intermediários de ressonância.

2.3 - A APROXIMAÇÃO DE PRIMEIRA ORDEM PARA Φ_f

A aproximação de primeira ordem do fluxo é obtida considerando-se as seguintes etapas. Introduza os fatores intermediários λ e κ definidos por:

$$K_f(\sigma_S \Phi_f) = \lambda \frac{\sigma_p}{E} + (1 - \lambda) \sigma_S(E) \Phi_f(E), \quad (2.3.1)$$

$$\sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) = \kappa \frac{\sigma_{am}}{E} + (1 - \kappa) \sigma_{am} \Phi_f(E). \quad (2.3.2)$$

Substituindo-se as equações (2.3.1) e (2.3.2) na equação (2.2.20), tem-se

$$\begin{aligned} \left\{ \sigma_t(E) + \bar{A}s[1 - Q(1 - \mu)] \right\} \Phi_f(E) = \frac{\lambda \sigma_p}{E} + (1 - \lambda) \sigma_s(E) \Phi_f(E) + \\ + \frac{\kappa \sigma_{am}}{E} + (1 - \kappa) \sigma_{am} \Phi_f(E) + \left\{ [1 - Q(1 - \mu)] \bar{A}s \right\} / E \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

Separando-se os termos multiplicando Φ_f e isolando-os ao lado esquerdo da equação obtém-se

$$\left\{ \sigma_t(E) - (1 - \lambda) \sigma_s(E) - (1 - \kappa) \sigma_{am} + \bar{A}s[1 - Q(1 - \mu)] \right\} \Phi_f(E) = \frac{\lambda \sigma_p}{E} + \frac{\kappa \sigma_{am}}{E} + \frac{[1 - Q(1 - \mu)] \bar{A}s}{E} \quad (2.3.4)$$

Fazendo-se as seguintes definições

$$\tilde{\sigma}_t = \sigma_t - (1 - \lambda) \sigma_s(E) - (1 - \kappa) \sigma_{am}, \quad (2.3.5)$$

$$\tilde{\sigma}_p = \lambda \sigma_p + \kappa \sigma_{am}, \quad (2.3.6)$$

e

$$\tilde{A}s = \bar{A}s[1 - Q(1 - \mu)]. \quad (2.3.7)$$

obtém-se a seguinte expressão

$$\left[\tilde{\sigma}_t(E) + \tilde{A}s \right] \Phi_f(E) = \frac{\tilde{\sigma}_p + \tilde{A}s}{E}, \quad (2.3.8)$$

e, finalmente, obtém-se a uma equação para $\Phi_f^{(1)}$, dada por

$$\Phi_f^{(1)}(E) = \frac{(\bar{\sigma}_p + \bar{A}s)}{[\bar{\sigma}_t(E) + \bar{A}s]} \cdot \frac{1}{E} \quad (2.3.9)$$

A equação (2.3.9) conduz à função ponderação no método de Bondarenko⁹, assumindo a aproximação NR para todos os nuclídeos ($\lambda = 1$, $\kappa=1$ e $\mu = 1$). Nesse caso

$$\Phi_f^{(1)}(E) = \frac{\sigma_p + \sigma_0}{\sigma_t(E) + \sigma_0} \cdot \frac{1}{E}, \quad (2.3.10)$$

onde

$$\sigma_0 = \sigma_{\text{th}} + \bar{A}s$$

A equação (2.3.10) tem sido extensivamente utilizada na área de reatores rápidos como função ponderação para obtenção de seções de choque de multigrupo parametrizadas em função de σ_0 (diluição) e T (temperatura).

2.4 - O SISTEMA ACOPLADO DE EQUAÇÕES PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

Substituindo-se a equação (2.2.19) na equação (2.2.11) e considerando-se que:

$$K_m(1/E) = 1/E \quad \text{e} \quad K_m(Q/E) = Q/E$$

tem-se que

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) + \frac{\bar{A}s(1-Q)}{E} + \bar{A}s Q K_m(\Phi_f). \quad (2.4.1)$$

Subtraindo, em ambos os lados da equação (2.4.1), os termos $(1-\lambda)\sigma_s \Phi_f$, $(1-\kappa)\sigma_{am} \Phi_f$ e $\bar{A}sQ(1-\mu)\Phi_f$ e rearranjando, tem-se

$$[\tilde{\sigma}_t(E) + \tilde{A}s] \Phi_f(E) = [K_f(\sigma_s \Phi_f) - (1-\lambda)\sigma_s \Phi_f(E)] + \sigma_{am} [K_{am}(\Phi_f) - (1-\kappa)\Phi_f] + \bar{A}sQ [K_m(\Phi_f) - (1-\mu)\Phi_f] + \frac{\bar{A}s(1-Q)}{E}. \quad (2.4.2)$$

Para a obtenção do sistema de equações descrevendo λ , κ e μ , rearranjou-se as equações (2.3.6) e (2.3.7), que ficaram, respectivamente como

$$\tilde{\sigma}_p = \sigma_p - (1-\lambda)\sigma_p + \sigma_{am} - (1-\kappa)\sigma_{am}, \quad (2.4.3)$$

$$\tilde{A}s = \bar{A}sQ[1 - (1-\mu)] + \bar{A}s(1-Q) \quad (2.4.4)$$

Voltando à equação (2.3.8) e substituindo-se as equações (2.4.3) e (2.4.4) do lado direito dessa equação e, admitindo-se a primeira aproximação do fluxo, tem-se

$$\begin{aligned} [\tilde{\sigma}_t(E) + \tilde{A}s]\Phi_f^{(1)}(E) = & \left[\sigma_p - (1-\lambda)\sigma_p \right] / E + \left\{ \sigma_{am} [1 - (1-\kappa)] \right\} / E + \\ & + \left\{ \bar{A}sQ [1 - (1-\mu)] + \bar{A}s(1-Q) \right\} / E \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

Multiplicando as equações (2.4.2) e (2.4.5) por

$$\sigma_a(E)\Phi_f^{(1)} = \frac{(\tilde{\sigma}_p + \tilde{A}s)\sigma_a(E)}{\tilde{\sigma}_t(E) + \tilde{A}s} \cdot \frac{1}{E}, \quad (2.4.6)$$

e subtraindo-se as equações resultantes uma da outra, tem-se

$$\begin{aligned} (\tilde{\sigma}_p + \tilde{A}s)\sigma_a \left[\Phi_f(E) - \Phi_f^{(1)}(E) \right] - & \left\{ \left[K_f(\sigma_s\Phi_f) - \frac{\sigma_p}{E} \right] - (1-\lambda) \left(\sigma_s(E)\Phi_f(E) - \frac{\sigma_p}{E} \right) \right\} E\sigma_a(E)\Phi_f^{(1)}(E) + \\ + \sigma_{am} \left\{ \left[K_{am}(\Phi_f) - \frac{1}{E} \right] - (1-\kappa) \cdot \left(\Phi_f(E) - \frac{1}{E} \right) \right\} & E\sigma_a(E)\Phi_f^{(1)}(E) + \\ + \bar{A}sQ \left\{ \left[K_m(\Phi_f) - \frac{1}{E} \right] - (1-\mu) \left(\Phi_f(E) - \frac{1}{E} \right) \right\} & E\sigma_a(E)\Phi_f^{(1)}(E) \end{aligned} \quad (2.4.7)$$

Rearranjando-se a equação (2.4.7) matematicamente e integrando na região de ressonância, tem-se

$$\begin{aligned} (\tilde{\sigma}_p + \tilde{A}s) \int \sigma_a(E) \left[\Phi_f(E) - \Phi_f^{(1)}(E) \right] dE = & Z_f - (1-\lambda)W_f + \sigma_{am} [Z_{am} - (1-\kappa)W_m] + \\ + \bar{A}sQ [Z_m - (1-\mu)W_m] \end{aligned} \quad (2.4.8)$$

onde

$$Z_f = \int \left[K_f(\sigma_S \Phi_f) - \frac{\sigma_P}{E} \right] E \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE, \quad (2.4.9)$$

$$W_f = \int \left[\sigma_S(E) \Phi_f(E) - \frac{\sigma_P}{E} \right] E \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE, \quad (2.4.10)$$

$$Z_{am} = \int \left[K_{am}(\Phi_f) - \frac{1}{E} \right] E \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE, \quad (2.4.11)$$

$$W_m = \int \left(\Phi_f(E) - \frac{1}{E} \right) E \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE, \quad (2.4.12)$$

$$Z_m = \int \left[K_m(\Phi_f) - \frac{1}{E} \right] E \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE. \quad (2.4.13)$$

Se os parâmetros intermediários de ressonância λ , κ e μ forem definidos como

$$\lambda = 1 - \frac{Z_f}{W_f}, \quad (2.4.14)$$

$$\kappa = 1 - \frac{Z_{am}}{W_m}, \quad (2.4.15)$$

$$\mu = 1 - \frac{Z_m}{W_m}, \quad (2.4.16)$$

tem-se que a integral de ressonância utilizando o fluxo aproximado de primeira ordem torna-se igual à do fluxo exato. Matematicamente

$$\int \sigma_a(E) \Phi_f(E) dE = \int \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE. \quad (2.4.17)$$

Dessa forma, pode-se afirmar que os fatores intermediários de ressonância são definidos, tal que exista uma equivalência entre as integrais de ressonância tendo como o fluxo o exato e a aproximação de primeira ordem.

As expressões para os parâmetros intermediários de ressonância, equações de (2.4.14) a (2.4.16), formam um sistema de equações acopladas, sendo assim recorre-se a um processo iterativo para a determinação de λ , κ e μ , assumindo-se inicialmente, todos os parâmetros iguais a 1 e admitindo-se o fluxo de nêutrons do absorvedor conhecido.

A equivalência entre integrais de ressonância expressa pela equação 2.4.17 compatibiliza taxa de reação calculada com o fluxo “exato” e a taxa de reação com o fluxo de primeira ordem. Esse aspecto é de suma importância na determinação dos parâmetros intermediários de ressonância visto que, a compatibilização é efetuada entre a solução da equação (2.2.20), que por hipótese descreve o melhor tratamento matemático para $\Phi_f(E)$ no problema em consideração, e a respectiva solução aproximada ou como no caso $\Phi_f^{(1)}$.

Na determinação dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo será de importância compatibilizar o cálculo de $\Phi_f(E)$ pelo procedimento considerado exato, e a aproximação considerada ($\Phi_f^{(1)}$) para o cálculo das constantes de multigrupo. No caso do sistema NJOY, $\Phi_f(E)$ é calculado na subrotina GENFLX do módulo GROUPT usando modelos matemáticos como o método de Bondarenko e a opção “flux calculator”. A Seção 2.5 descreve em algum detalhe o procedimento do código NJOY.

As equações (2.4.14) a (2.4.16) têm sido extensivamente utilizadas^{5,10-12} para obter parâmetros intermediários de ressonâncias isoladas descritas pelo formalismo de Breit-Wigner.

2.5 - O SISTEMA DE PRÉ-PROCESSAMENTO DE DADOS NUCLEARES NJOY E A COMPATIBILIZAÇÃO COM O EQUACIONAMENTO PARA A DETERMINAÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

O sistema de processamento de dados nucleares, código NJOY⁴, é uma coletânea de vários módulos para produzir seções de choque pontuais e de multigrupo a partir da biblioteca de dados nucleares avaliados ENDF. O sistema NJOY, tem sido extensivamente utilizado na área de Física de Reatores para elaboração de biblioteca de dados nucleares de vários códigos celulares como o EPRI-CELL¹³, WIMS¹⁴, SRAC¹⁵, etc... A subrotina GENFLX do módulo GROUPE do código NJOY possui dois métodos para o cálculo de $\Phi_f(E)$ utilizado como função ponderação na região de ressonância: o método de Bondarenko e a opção "flux calculator". O modelo de Bondarenko utiliza basicamente a equação (2.3.10) com correções para levar em consideração o comportamento "suave" do fluxo de nêutrons, também permite o cálculo de $\Phi_f(E)$ utilizando ordens superiores das componentes de Legendre (método de multibanda)¹⁶. O método de Bondarenko tem sido utilizado extensivamente na área de reatores rápidos.

Na área de reatores térmicos o tratamento adequado da região de energia do nêutron compreendida entre 1 e 500 eV é importante visto que, existem várias ressonâncias com larguras consideradas amplas e intermediárias que não podem ser autoblindadas com a precisão adequada utilizando o método de Bondarenko. A opção "flux calculator" da subrotina GENFLX foi especialmente elaborada para tratar essa classe de problemas.

Antes de discutir em detalhes a utilização da opção “flux calculator” da subrotina GENFLX, é essencial a compatibilização entre o sistema de equações derivado neste capítulo e as equações utilizadas na subrotina GENFLX do código NJOY.

Inicialmente considere a equação (2.2.18)

$$Q = \frac{\bar{A}s}{s_m} \cdot \frac{1}{\mu + (1 - \mu) \frac{\bar{A}s}{s_m}}, \quad (2.5.1)$$

e da referência 4 (manual do código NJOY)

$$\beta = \frac{V_r \sigma_c}{V_m \sigma_m}, \quad (2.5.2)$$

onde σ_c é uma função que varia suavemente com a energia chamada de seção de choque de escape e σ_m é a seção de choque macroscópica total do moderador. Conforme já mencionado, tem-se

$$s_m = \frac{\sigma_m V_m}{N_r V_f}. \quad (2.5.3)$$

Dessa forma, pode-se reescrever o termo $\bar{A}s/s_m$, como

$$\frac{\bar{A}s}{s_m} = \frac{\bar{A}s}{\frac{\sigma_m V_m}{N_r V_f}} = \frac{\bar{A}s N_r V_f}{\sigma_m V_m} \quad (2.5.4)$$

Introduzindo a seção de choque macroscópica de escape σ_e , como $\sigma_e = \bar{A}sN_r$, tem-se

$$\frac{\bar{A}s}{s_m} = \frac{\sigma_e V_f}{\sigma_m V_m}, \quad (2.5.5)$$

esta equação é compatível à Eq.(2.5.2) e, portanto, ao código NJOY. Sendo assim, tem-se β como um parâmetro de heterogeneidade dado por

$$\beta = \frac{\bar{A}s}{s_m} \quad (2.5.6)$$

Voltando à equação (2.2.19) dada por

$$\Phi_m^{(1)}(E) = \frac{1}{E} - Q \left[\frac{1}{E} - \Phi_f(E) \right],$$

e modificando a equação (2.5.1) conforme a equação (2.5.6), tem-se que

$$Q = \beta \cdot \frac{1}{\mu + (1 - \mu) \cdot \beta}, \quad (2.5.7)$$

e somente se $\mu=1$, tem-se

$$Q = \beta. \quad (2.5.8)$$

Portanto, a compatibilização com o código NJOY é efetuada assumindo $\mu=1$ na expressão de Q (Eq.2.5.7).

Agora, substituindo a equação (2.5.8) em (2.2.19), obtém-se

$$\Phi_m^{(1)}(E) = \frac{1}{E} - \beta \left[\frac{1}{E} - \Phi_f(E) \right] = \frac{(1-\beta)}{E} + \beta \Phi_f(E), \quad (2.5.9)$$

que é a Eq.(34) do manual do código NJOY⁴, salvo que o fator $1/E$ está representado por $C(E)$.

Compatibilizando agora a Eq.(2.2.20) com a Eq.(33) do manual do código NJOY, para $\mu=1$, tem-se

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) + \frac{\bar{A}s}{E}, \quad (2.5.10)$$

e substituindo a Eq.(2.3.2) na equação (2.5.10), tem-se

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \frac{\kappa \sigma_{am}}{E} + (1-\kappa) \sigma_{am} \Phi_f(E) + \frac{\bar{A}s}{E}, \quad (2.5.11)$$

separando os termos que multiplicam Φ_f , tem-se

$$[\sigma_t(E) - \sigma_{am} + \bar{A}s + \kappa \sigma_{am}] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \frac{(\kappa \sigma_{am} + \bar{A}s)}{E} \quad (2.5.12)$$

Sabendo que σ_{tf} , é a seção de choque total do combustível definida como

$$\sigma_{tf} = \bar{\sigma}_t - \sigma_{am}, \quad (2.5.13)$$

substituindo-se na Eq.(2.5.12)

$$(\sigma_{tf} + \bar{A}s + \kappa\sigma_{am})\Phi_f = K_f(\sigma_s\Phi_f) + \frac{(\kappa\sigma_{am} + \bar{A}s)}{E}, \quad (2.5.14)$$

e definindo a seção de choque de “background” σ_0 como

$$\sigma_0 = \bar{A}s + \kappa\sigma_{am}, \quad (2.5.15)$$

e, substituindo na equação (2.5.14), tem-se

$$(\sigma_{tf} + \sigma_0)\Phi_f = K_f(\sigma_s\Phi_f) + \frac{\sigma_0}{E}, \quad (2.5.16)$$

Portanto, voltando à equação (2.5.16) e, substituindo as equações citadas anteriormente, conclui-se que

$$[\sigma_{tf}(E) + \sigma_0]\Phi_f(E) = \frac{\sigma_0}{E} + \int_E^{E/\alpha_f} \frac{\sigma_s(E')}{(1 - \alpha_f)E'} \cdot \Phi_f(E')dE', \quad (2.5.17)$$

que é a equação idêntica à Eq.(33) do manual do código NJOY, onde novamente o fator $1/E$ é representado por $C(E)$.

Agora será feita a compatibilização da Eq.(2.2.11) com a Eq.(37) do manual do código NJOY. Partindo da equação referida, mas desprezando a integral de $K_{am}(\Phi_f)$, ou seja, desprezando o moderador do combustível, tem-se

$$(\sigma_t + \bar{A}s)\Phi_f(E) = K_f(\sigma_s\Phi_f) + \bar{A}sK_m(\Phi_m), \quad (2.5.18)$$

sabendo que

$$K_m(\Phi_m) = K_m \left[\frac{1}{E} - Q \left(\frac{1}{E} - \Phi_f \right) \right], \quad (2.5.19)$$

e que novamente:

$$K_m \left(\frac{1}{E} \right) = \frac{1}{E} \quad \text{e} \quad K_m \left(\frac{Q}{E} \right) = \frac{Q}{E}$$

e voltando na Eq.(2.5.19)

$$K_m(\Phi_m) = \frac{1}{E} - Q \left[\frac{1}{E} - K_m(\Phi_f) \right], \quad (2.5.20)$$

substituindo a equação acima na Eq.(2.5.18), obtemos

$$[\sigma_t(E) + \bar{A}s]\Phi_f = K_f(\sigma_s\Phi_f) + \frac{\bar{A}s(1-Q)}{E} + \bar{A}sQK_m(\Phi_f). \quad (2.5.21)$$

Sabendo que:

$$\bar{A}s \rightarrow \sigma_0 \quad \text{e} \quad Q \rightarrow \beta$$

tem-se, finalmente

$$[\sigma_t(E) + \sigma_0] \Phi_f(E) = \int_0^{E/\alpha_f} \frac{\sigma_s(E') \Phi_f(E')}{(1 - \alpha_f) E'} \cdot dE' + \frac{\sigma_0(1 - \beta)}{E} + \sigma_0 \beta \int_E^{E/\alpha_m} \frac{\Phi_f(E')}{(1 - \alpha_m) E'} \cdot dE' \quad (2.5.22)$$

Esta equação é compatível com a Eq.(37) do manual do código NJOY, como queria-se demonstrar, sendo que o fator $1/E$ é representado por $C(E)$ como anteriormente citado.

Portanto, do exposto, pode-se afirmar que o sistema de equações para a determinação de $\Phi_f(E)$ obtido nesse trabalho é compatível com as equações do código NJOY. Esse aspecto é fundamental para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância nesse trabalho, visto que, o fluxo “exato” será obtido pela subrotina GENFLX do sistema NJOY.

A opção “flux calculator” da subrotina GENFLX ainda admite a presença de mais um nuclide moderador presente no combustível (ex: o oxigênio do UO_2). A equação (2.5.22) é resolvida pela subrotina GENFLX entre uma energia máxima EHI (região de ressonâncias resolvidas) e o limite da região térmica. Acima de EHI é utilizado o método de Bondarenko. A solução da equação (2.5.22) depende de dois parâmetros β e σ_0 que devem ser fornecidos antecipadamente ao programa.

A solução da equação (2.5.22) pode fornecer $\Phi_f(E)$ com uma riqueza de detalhes muito próximas do ideal para utilização em ponderação de seções de choque para uma variedade ampla de combustíveis com ou sem moderador interno e/ou moderador externo.

Devido ao recurso computacional exigido, e também devido a parametrização com β e σ_0 , a equação (2.5.22) é raramente utilizada para o cálculo da função $\Phi_f(E)$ utilizada como função ponderação das constantes de multigrupo. Na elaboração da biblioteca de seções de choque em multigrupo do código EPRI-CELL¹³ e mais recentemente do código

WIMS¹⁴ utilizou-se a versão simplificada da equação (2.5.22) com $\beta = 0$. Nesse caso, obtém-se a equação (2.5.17) que é a expressão utilizada para o cálculo de $\Phi_f(E)$.

Nesse ponto, é fundamental o entendimento de como a compatibilização entre solução “exata” e solução aproximada expressa pela equação (2.4.17) deve ser estendida ao caso da utilização do sistema NJOY. A solução para $\Phi_f(E)$ considerada “exata” será obtida por meio da equação (2.5.22) incluindo no caso mais genérico um moderador no combustível, e a solução aproximada para $\Phi_f(E)$ será obtida através da equação (2.5.17). A Seção 2.6 esboçará em detalhes o procedimento de compatibilização utilizado nesse trabalho.

2.6 - COMPATIBILIZAÇÃO COM O PROCEDIMENTO DE GERAÇÃO DE SEÇÃO DE CHOQUE UTILIZANDO A OPÇÃO “FLUX CALCULATOR” DA SUBROTINA GENFLX DO CÓDIGO NJOY

A geração de bibliotecas de seções de choque em reatores rápidos é normalmente efetuada utilizando a função ponderação $\Phi_f^{(1)}$ (equação (2.3.9)). Entretanto, na área de reatores térmicos, como é o escopo do trabalho, necessita-se de hipóteses menos restritivas que podem ser obtidas fazendo-se a aproximação intermediária de ressonância para todos os núclídeos exceto o núclídeo particular no qual está sendo considerado.

Para esse propósito considere a equação (2.5.22) incluindo o termo $\sigma_{am}K_{am}(\Phi_f)$, portanto tem-se

$$[\sigma_t(E) + \sigma_o] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) + \sigma_o \beta K_m(\Phi_f) + \frac{\sigma_o(1-\beta)}{E}, \quad (2.6.1)$$

onde, agora, σ_o representa $\bar{\sigma}_s$.

Esta equação é resolvida pelo código NJOY considerando-se a aproximação $Q = \beta$, e que será considerado como fluxo “exato” para a determinação dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo de energia após modificações na subrotina GENFLX, onde não é considerada a presença de um terceiro moderador, por exemplo o oxigênio da água ($\Gamma \rightarrow 0$).

Agora reescrevendo a equação (2.2.20) como sendo:

$$\left[\sigma_t(E) + \tilde{A}s \right] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am} K_{am}(\Phi_f) + \frac{\tilde{A}s}{E}, \quad (2.6.2)$$

onde

$$\tilde{A}s = \bar{A}s [1 - Q(1 - \mu)],$$

e sendo

$$K_{am}(\Phi_f) = \frac{\kappa}{E} + (1 - \kappa) \Phi_f(E), \quad (2.6.3)$$

portanto a equação (2.6.2) torna-se

$$\left[\sigma_{tf}(E) + \tilde{A}s + \kappa \sigma_{am} \right] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \frac{\tilde{A}s + \kappa \sigma_{am}}{E}, \quad (2.6.4)$$

onde σ_{tf} é definido pela equação (2.5.13) e compatibilizando, tem-se

$$\sigma_{01} = \kappa \sigma_{am} + \sigma_0 [1 - \beta(1 - \mu)], \quad (2.6.5)$$

com $Q = \beta$ e $\bar{A}s = \sigma_0$ como anteriormente. Portanto

$$[\sigma_{tf}(E) + \sigma_{01}] \Phi_f^{(1)}(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f^{(1)}) + \frac{\sigma_{01}}{E} \quad (2.6.6)$$

A equivalência entre taxas de absorção na região de ressonância será efetuada assumindo os fluxos obtidos pela solução da equação (2.6.1) como o “exato” e pelo fluxo obtido pela solução da equação (2.6.4) assumido como aproximado. Não haverá necessidade de calcular o fator intermediário de ressonância para o nuclídeo no qual a equação está sendo resolvida, visto que, já está sendo levado em consideração.

Para obter o sistema de equações para os parâmetros intermediários de ressonância nesse caso, considere a equação (2.6.1) e subtraia em ambos os lados dessa equação as seguintes expressões: $\sigma_{am}(1-\kappa)\Phi_f$ e $\beta\sigma_0(1-\mu)\Phi_f$.

$$[\sigma_t(E) + \sigma_{01}] \Phi_f(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f) + \sigma_{am}[K_{am}(\Phi_f) - (1-\kappa)\Phi_f] + \beta\sigma_0[K_m(\Phi_f) - (1-\mu)\Phi_f(E)] + \sigma_0 \frac{1-\beta}{E} \quad (2.6.7)$$

Similarmente, rearranjando a equação (2.6.6)

$$[\sigma_t(E) + \sigma_{01}] \Phi_f^{(1)}(E) = K_f(\sigma_s \Phi_f^{(1)}) + \frac{\sigma_{am}[1 - (1-\kappa)]}{E} + \frac{\beta\sigma_0}{E} [1 - (1-\mu)] + \frac{\sigma_0(1-\beta)}{E} \quad (2.6.8)$$

Multiplicando-se as equações (2.6.7) e (2.6.8) por

$$E\sigma_a(E)\Phi_f^{(1)}(E) = \frac{W(E) + \sigma_{01}\sigma_a(E)}{\sigma_t(E) + \sigma_{01}} \quad (2.6.9)$$

onde

$$\sigma_a(E)W(E) = EK_f(\sigma_s\Phi_f^{(1)}), \quad (2.6.10)$$

Subtraindo as equações resultantes, tem-se

$$\begin{aligned} \sigma_{01}\sigma_a(E)\left[\Phi_f(E) - \Phi_f^{(1)}(E)\right] &= K_f(\sigma_s\Phi_f)\Phi_f^{(1)}(E)E\sigma_a(E) - K_f(\sigma_s\Phi_f^{(1)})\Phi_f(E)E\sigma_a(E) + \\ &+ \sigma_{am}\left\{\left[K_{am}(\Phi_f) - \frac{1}{E}\right] - (1-\kappa)\left[\Phi_f(E) - \frac{1}{E}\right]\right\}E\sigma_a(E)\Phi_f^{(1)}(E) + \\ &+ \beta\sigma_0\left\{\left[K_m(\Phi_f) - \frac{1}{E}\right] - \left[(1-\mu)\left(\Phi_f(E) - \frac{1}{E}\right)\right]\right\}E\sigma_a(E)\Phi_f^{(1)}(E) \end{aligned} \quad (2.6.11)$$

rearranjando-se a equação matemática e integrando-se na região de ressonância, tem-se como anteriormente

$$\begin{aligned} \sigma_{01} \int \left\{ \sigma_a(E) \left[\Phi_f(E) - \Phi_f^{(1)}(E) \right] dE \right\} &= \int \left[K_f(\sigma_s\Phi_f)\Phi_f^{(1)}(E) - K_f(\sigma_s\Phi_f^{(1)})\Phi_f(E) \right] E\sigma_a(E) dE + \\ &+ \sigma_{am} \left[Z_{am} - (1-\kappa)W_m \right] + \beta\sigma_0 \left[Z_m - (1-\mu)W_m \right] \end{aligned} \quad (2.6.12)$$

onde Z_{am} , W_m e Z_m são dados pelas equações (2.4.11), (2.4.12) e (2.4.13) respectivamente.

Uma vez mais, se os parâmetros intermediários de ressonância forem definidos como:

$$\kappa = 1 - \frac{Z_{am}}{W_m} \quad \text{e} \quad \mu = 1 - \frac{Z_m}{W_m}$$

tem-se que a integral de ressonância utilizando o fluxo $\Phi_f^{(1)}$ torna-se igual à do fluxo “exato” e, portanto, tem-se

$$\int \sigma_a(E) \Phi_f(E) dE = \int \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE, \quad (2.6.13)$$

desde que

$$\int \left[K_f(\sigma_s \Phi_f) \Phi_f^{(1)}(E) - K_f(\sigma_s \Phi_f^{(1)}) \Phi_f(E) \right] E \sigma_a(E) dE = 0, \quad (2.6.14)$$

fato esse que será demonstrado amplamente no decorrer deste trabalho.

Portanto, pode-se compatibilizar o procedimento amplamente utilizado na determinação dos parâmetros intermediários de ressonância com os procedimentos de obter $\Phi_f(E)$ conforme o código NJOY. Dessa forma os parâmetros intermediários de ressonância obtidos pelo procedimento exposto serão compatíveis com o procedimento de ponderação das seções de choque em multigrupo e preservarão o procedimento comumente utilizado no cálculo desses parâmetros.

O procedimento proposto nesse trabalho para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo de energia preserva o procedimento de cálculo das constantes de multigrupo do código NJOY e ao mesmo tempo não impõe outras restrições nos métodos comumente utilizados para o cálculo desses parâmetros.

2.7 - PROCEDIMENTOS COMUMENTE UTILIZADOS PARA A OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

Antes de definir a estratégia para a obtenção dos parâmetros IR no formalismo de multigrupo, considere as hipóteses comumente utilizadas para a obtenção desses parâmetros. As hipóteses comumente consideradas são:

1- Φ_f nas equações de (2.4.9) a (2.4.12) são representados pela aproximação de primeira ordem $\Phi_f^{(1)}$. Vários trabalhos^{2,17-19} consideram aproximações de segunda e terceira ordem, mas com resultados semelhantes aos de primeira ordem.

O fluxo de primeira ordem é dado pela equação

$$\Phi_f^{(1)}(E) = \frac{\tilde{\sigma}_p + \sigma_0}{\tilde{\sigma}_t(E) + \sigma_0} \cdot \frac{1}{E}, \quad (2.7.1)$$

onde

$$\tilde{\sigma}_p = \lambda\sigma_p + \kappa\sigma_{am}, \quad (2.7.2)$$

$$\sigma_0 = [1 - Q(1 - \mu)]\bar{A}s. \quad (2.7.3)$$

2- Ressonâncias isoladas descritas pelo formalismo Single-Level Breit-Wigner¹, onde:

-a seção de choque de absorção da ressonância do absorvedor é:

$$\sigma_a = \sigma_1 \cdot \frac{\Gamma_\gamma + \Gamma_f}{\Gamma} \cdot (1 + x^2)^{-1}, \quad (2.7.4)$$

-a seção de choque de espalhamento total da ressonância do absorvedor é

$$\sigma_S = \sigma_1 \cdot \frac{\Gamma_n}{\Gamma} (1 + x^2)^{-1} + \frac{2\sigma_{op}x}{1 + x^2} + \sigma_p, \quad (2.7.5)$$

onde

$$\sigma_{op} = \left(\frac{\sigma_1 \sigma_p g \Gamma_n}{\Gamma} \right)^{1/2}, \quad (2.7.6)$$

e

$$x = \frac{2(E - E_r)}{\Gamma}, \quad (2.7.7)$$

sendo, σ_1 definido como seção de choque de pico da ressonância, Γ_γ a largura de linha radiativa, Γ_n a largura de linha do nêutron, Γ a largura de linha total, Γ_f a largura de linha de fissão, g o fator de spin e E_r é a energia de ressonância.

3- $T=0K$. Essa hipótese não é totalmente restritiva e existem correções para se levar em conta outras temperaturas^{11,19,20}.

$$4- K(\Psi) \cong \delta^{-1} \int_x^{x+\delta} \Psi(x') dx', \quad (2.7.8)$$

onde

$$\delta = [2E_r(1-\alpha)/\Gamma]. \quad (2.7.9)$$

5- As integrais envolvidas nas equações (2.4.9) a (2.4.12), são efetuadas em todo o domínio de energia do nêutron.

Através dessas hipóteses pode-se obter equações transcendentais acopladas para λ , κ e $\mu^{2,5,10}$ e, utilizando um processo iterativo pode-se obter esses parâmetros.

Para efeitos ilustrativos considere $\mu=1$. Nesse caso tem-se¹¹

$$\lambda = 1 - \frac{\arctan. z_{\lambda}}{z_{\lambda}}, \quad (2.7.10)$$

$$\kappa = 1 - \frac{\arctan. z_{\kappa}}{z_{\kappa}}, \quad (2.7.11)$$

onde

$$z_{\lambda} = \frac{\delta_{\lambda}}{2\beta} \quad e \quad z_{\kappa} = \frac{\delta_{\kappa}}{2\beta}$$

e

$$\beta^2 = 1 + \frac{\sigma_0}{\lambda\sigma_p + \kappa\sigma_{am} + S} \cdot \frac{\Gamma_{\gamma} + \lambda\Gamma_n}{\Gamma}, \quad (2.7.12)$$

o que mostra claramente o acoplamento entre λ e κ e adota-se um procedimento iterativo para a obtenção desses parâmetros.

2.8 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA NO FORMALISMO DE MULTIGRUPO

O procedimento de obtenção dos parâmetros IR no formalismo de multigrupo segue basicamente os mesmos passos e as equações (2.4.14) a (2.4.16), como anteriormente. A diferença é que a integral da equação (2.4.8) é considerada no multigrupo de interesse e a equivalência entre a integral efetiva de ressonância é expressa no multigrupo de interesse, ou seja

$$\int_{\bar{g}} \sigma_a(E) \Phi_f(E) dE = \int_{\bar{g}} \sigma_a(E) \Phi_f^{(1)}(E) dE. \quad (2.8.1)$$

As integrais envolvidas nas equações (2.4.14) a (2.4.16) serão efetuadas no multigrupo de interesse. O método proposto não exige nenhuma limitação quanto ao formalismo da descrição das ressonâncias nem quanto a temperatura e, as ressonâncias, não necessariamente devem estar isoladas podendo haver inclusive várias ou frações de ressonâncias num mesmo grupo de energia. As integrais envolvidas nas equações (2.4.14) a (2.4.16) não serão obtidas analiticamente, mas sim numericamente. As seções de choque devem ser fornecidas por um código de pré-processamento de dados nucleares como o sistema NJOY⁴.

Para implementar o procedimento de obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo de energia fez-se necessário a introdução dos seguintes processos:

1- introduzir método um numérico para o cálculo de Z_f , W_f , Z_m e W_m no grupo de energia de interesse. Nesse caso obtém-se a equivalência entre a integral efetiva de ressonância no multigrupo de interesse.

2- introduzir método numérico para obter as integrais $K(\varphi)$, para calcular as integrais $K_f(\sigma_s\Phi_f)$, $K_{am}(\Phi_f)$ e $K_m(\Phi_f)$. Neste trabalho utilizou-se a formulação matemática utilizada pelo módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II²¹ a qual será mostrada no próximo capítulo.

Analogamente ao que foi descrito anteriormente, o sistema acoplado de equações para a determinação dos fatores intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo proposto neste trabalho será feita por meio de um processo iterativo.

O procedimento proposto para o cálculo dos fatores intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo de energia é geral e não faz nenhuma menção específica à forma funcional de $\Phi_f(E)$ ou $\Phi_f^{(1)}(E)$. Portanto, pode-se aplicar, e será aplicado, todo o procedimento de obtenção dos fatores intermediários de ressonância conforme exposto na Seção 2.6.

2.9 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 2

- 1 - Breit, G. and Wigner, E.P., Capture of Slow Neutrons, Phys. Rev., 49, 519 (1936).
- 2 - Goldstein, R. and Cohen, E.R., Theory of Resonance Absorption of Neutrons, Nuclear Sci. and Eng., 13, 132 (1962).
- 3 - Williams, M.L., Correction of Multigroup Cross Sections for Resolved Resonance Interference in Mixed Absorbers, Nucl. Sci. Eng., 83, 37 (1983).
- 4 - MacFarlane, R. E., Muir, D.W., Boicourt, R.M., The NJOY Nuclear Data Processing System, Vol-I: User's Manual, Report LA-9393-M (1982).
- 5 - Mizuta, H. and Yamamoto, M., Improved Intermediate Resonance Approximation in Heterogeneous System, Journal Nucl. Sci. Technol., 21[3], 161 (1984).
- 6 - Bell, G. I. and Glasstone, S., Nuclear Reactor Theory, Van Nostrand Reinhold Company, New York (1970).
- 7 - Lamarsh, J. R., Introduction to Nuclear Reactor Theory, Addison-Wesley Publishing Company (1972).
- 8 - Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J., Nuclear Reactor Analysis, John Wiley & Sons, Inc. (1976).
- 9 - Bondarenko, J. J., Ed. Group Constants for Nuclear Reactor Calculations, Consultants Bureau, New York (1964).
- 10 - Ishiguro, Y. and Takano, H., Intermediate Neutron Resonance Absorption with Interference Scattering in Heterogeneous Systems, Journal Nucl. Sci. Technol, 6[7], 380 (1969).

- 11 - Ishiguro, Y., Inoue, S. and Takano, H., Temperature Dependence of Parameters Used in Intermediate Treatment of Resonance Absorption, Journal Nucl. Sci. Technol, 6/6], 308 (1969).
- 12 - Ishiguro, Y., Exact Treatment of the Resonance Absorption of Neutrons of Intermediate Energy, Journal Nucl. Sci. Technol., 32, 422 (1968).
- 13 - Williams, M.L., Wright, R.Q., Barhen, J., Rothenstein, W. and Toney, B., Benchmarking of Epithermal Methods in the Lattice Physics Code EPRI-CELL, Proceedings: Thermal Reactor Benchmark Calculations, Techniques, Results, and Applications, Brookhaven National Lab., Upton, NY(USA), (Feb.1983).
- 14 - Askew, J.R., Fayers, F.J. and Kemshell, P.B., A General Description of the Code WIMS, Journal British Nucl. Energy Soc., 564 (Oct.1966).
- 15 - Tsuchihashi, K., Takano, H., Horikami, K. and Ishiguro, Y., SRAC: JAERI Thermal Reactor Standard Code System for Reactor Design and Analysis, JAERI-1285, Japan Atomic Energy Research Institute (1983).
- 16 - Roney, Y., Handbook of Nuclear Reactors Calculations, Vol. I, 102, CRC Press, Boca Raton, Flórida (1986).
- 17 - Dyos, M. W. and Keane, A., Iterative Solution of the Neutron Slowing Down Equation, Nucl. Sci. Eng., 26, 530 (1966).
- 18 - Kruijf, F. de, Iteration and Intermediate Resonance Neutron Absorption in Multinuclide Systems, Nucl. Sci. Eng., 36, 107 (1969).
- 19 - Goldstein, R., Temperature-Dependent Intermediate Neutron Resonance Integrals, Nucl. Sci. Eng., 48, 248 (1972).

20 - McKay, M. H. and Pollard, J. P., *Effect of Temperature Variation on "Intermediate-Resonance" Formulas*, Nucl. Sci. Eng., 16, 243 (1963).

21 - Greene, N.M. et alli, *AMPX-II: A Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron Gama Libraries from Data in ENDF Format*, PSR-63, Oak Ridge, Tennessee, (1978).

**CAPÍTULO 3 - ELABORAÇÃO DO PROGRAMA PARA O CÁLCULO DOS
PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA**

3.1 - INTRODUÇÃO

3.2 - OBTENÇÃO DO FLUXO E DAS SEÇÕES DE CHOQUE

3.3 - OBTENÇÃO DAS INTEGRAIS DE MODERAÇÃO

3.4 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 3

CAPÍTULO 3 -PROCEDIMENTO COMPUTACIONAL

3.1 - INTRODUÇÃO

Os parâmetros intermediários de ressonância apresentados no Capítulo 2 são funções do fluxo de nêutrons e de seções de choque. O fluxo de nêutrons e as seções de choque a serem utilizados para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância serão provenientes do código NJOY¹. Utilizando-se do fluxo de nêutrons e das seções de choque foi elaborado um programa computacional para o cálculo desses parâmetros. Nas seções subsequentes é apresentado o procedimento para a obtenção do fluxo e das seções de choque através do código NJOY e, posteriormente, o programa elaborado para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância.

Para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância foi elaborado um programa computacional em linguagem FORTRAN. O programa basicamente, utiliza dados provenientes do módulo GROUPT do código NJOY e através de um processo iterativo calcula os parâmetros intermediários de ressonância para um dado intervalo de energia e dado um σ_p (seção de choque potencial) e σ_0 (fator de diluição). O efeito da temperatura do meio é considerado através do efeito Doppler nas seções de choque e do efeito do mesmo em $\Phi_f(E)$ conforme obtido através do NJOY.

A Figura 3.1.1 ilustra esquematicamente o fluxograma para obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância.

O programa é inicializado com três arquivos, um contendo o fluxo de nêutrons dependente da temperatura e diluição, e os outros dois contendo seção de choque total e seção de choque de espalhamento elástico dependente da temperatura. O arquivo de fluxo de nêutrons é proveniente da saída do módulo GROUPR para uma dada temperatura e diluição apresentado numa forma tabular em pares de energia e fluxo. Analogamente os arquivos de seções de choque são apresentados da mesma maneira. Internamente ao programa são efetuadas as definições das variáveis como o intervalo inicial E_{high} e o final de energia E_{low} da região epitérmica, seção de choque potencial e outros. Os arquivos de fluxo e seções de choque encontram-se em intervalos de energias distintas, desta forma antes de iniciar o cálculo para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância é efetuada uma compatibilização dos intervalos de energia dos arquivos.

Embora, a Figura (3.1.1) ilustre o procedimento para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância utilizando o procedimento exposto na Seção 2.6, isto é, com o fluxo de nêutrons obtido via subrotina GENFLX do módulo GROUPR, o programa elaborado possui ainda a possibilidade de cálculo dos parâmetros intermediários de ressonância utilizando o procedimento de ressonâncias isoladas com a aproximação do fluxo de primeira ordem como também, da utilização das seções de choque proveniente do código NJOY e também do fluxo de primeira ordem.

PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

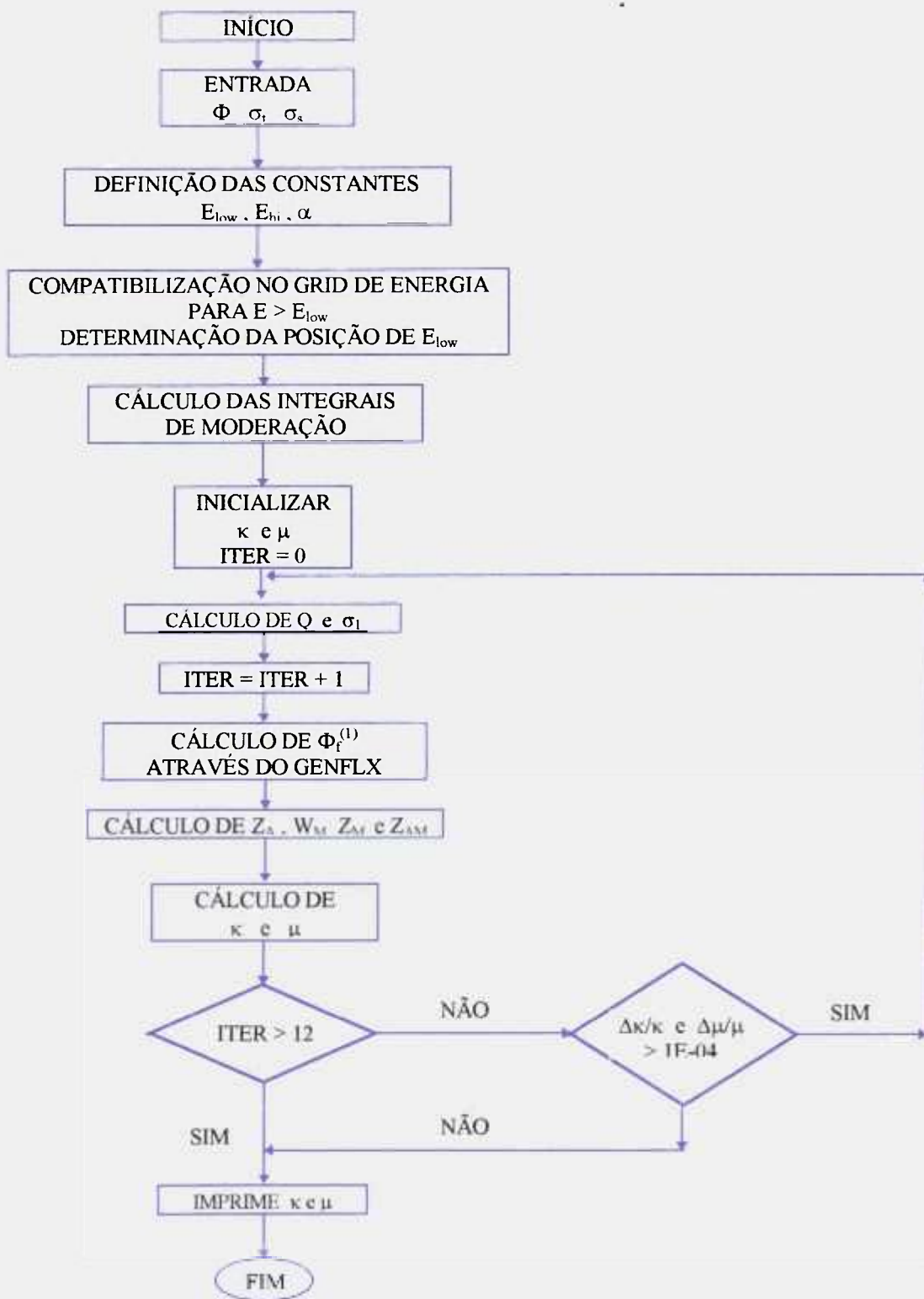


Figura 3.1.1 - Fluxograma de cálculo

3.2 - OBTENÇÃO DO FLUXO E DAS SEÇÕES DE CHOQUE

O código NJOY é um sistema modular de pré-processamento de bibliotecas de dados nucleares básicos (ENDF/B-VI², JENDL³, etc...). O sistema é utilizado para a obtenção de seções de choque pontuais e de multigrupo dependentes da temperatura e da diluição do sistema, utilizando para esse propósito a função de ponderação fornecida pelo usuário ou calculada internamente no programa. As seções de choque pontuais $\sigma_{n,\gamma}$ e σ_s são utilizadas posteriormente no programa desenvolvido para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância.

O código NJOY é dividido em vários módulos, cada qual com sua função de processamento bem definida, que são utilizados de acordo com as necessidades do usuário.

Para o programa elaborado, foi preciso obter o fluxo de nêutrons e as seções de choque total e de espalhamento elástico para o absorvedor epitérmico principal que no caso considerado será o urânio-238 (por exemplo, biblioteca ENDF/B-IV) na forma pontual em energia, e desta forma executou-se os seguintes módulos do código NJOY:

- MODER
- RECONR
- BROADR
- UNRESR
- GROUPE

Descreve-se abaixo de forma sucinta os módulos utilizados e suas respectivas funções:

MODER: transforma um arquivo formatado(ASCII) em um arquivo binário ou vice-versa, fornecendo uma economia no meio físico de armazenamento.

RECONR: reconstrói explicitamente a dependência energética das seções de choque numa forma pontual e num “grid” único de energia a partir dos parâmetros de ressonância e das leis de interpolação da ENDF/B. As seções de choque resultantes são escritas em um arquivo denominado PENDF (‘Point Wise Evaluated Nuclear Data File’) que possui a mesma padronização do formato ENDF. Neste ponto é pré-fixada a tolerância para a interpolação linear e a quantidade de dígitos significativos para a representação dos dados.

BROADR: realiza o alargamento Doppler das reações contidas até a energia máxima fornecida pelo usuário. O alargamento Doppler é efetuado para uma dada temperatura de aplicação e o resultado final também é escrito num novo arquivo PENDF. As seções de choque pontuais $\sigma_i(E)$ e $\sigma_s(E)$ são obtidas nesse ponto do processamento de dados.

UNRESR: produz seções de choque efetivas na região de ressonância não-resolvida utilizando o método do código ETOXS⁴. Os dados são escritos numa forma tabular: seções de choque em função da temperatura e σ_0 (background cross sections) na região de ressonância não resolvida. O resultado é adicionado ao arquivo PENDF.

GROUPE: transforma as seções de choque pontuais em parâmetros de multigrupo utilizando o método de Bondarenko, ou os procedimentos da subrotina GENFLX conforme exposto na Seção 2.5. Nesse ponto, o elo de ligação entre os dados nucleares independentes da aplicação e os dados nucleares para uma aplicação específica é introduzido através da estrutura de multigrupo (intervalos de energia) e do espectro de ponderação adequado ao problema. Os resultados são gravados num arquivo denominado GENDF (Groupwise ENDF). Ao final do módulo GROUPE são produzidos os arquivos finais contendo o fluxo de nêutrons numa forma tabular.

O cálculo do fluxo realizado dentro do módulo GROUPR é feito pela subrotina GENFLX que calcula o fluxo de nêutrons para vários valores do parâmetro β e várias diluições resolvendo a equação abaixo representada

$$\begin{aligned}
 [\sigma_0 + \sigma_t(E)]\Phi_f(E) = & (1 - \beta)C(E)\sigma_0 + \int_E^{E/\alpha_m} \frac{\beta\sigma_0}{(1 - \alpha_m)E'} \Phi_f(E')dE' + \\
 & + \int_E^{E/\alpha_f} \frac{\sigma_{sf}(E')}{(1 - \alpha_f)E'} \Phi_f(E')dE' + \int_E^{E/\alpha_{am}} \frac{\sigma_{am}}{(1 - \alpha_{am})E'} \Phi_f(E')dE'
 \end{aligned}$$

Eq.(3.2.1)

que é a equação (37) do manual do código NJOY acrescida da integral para o moderador interno a mistura e onde $C(E)$ é assumida como uma função suave da energia. Nessa equação β e σ_0 são parâmetros livres da equação.

A equação (3.2.1) é utilizada pelo código NJOY quando a opção “flux calculator” é solicitada. Nesse caso a subrotina GENFLX resolve a equação (3.2.1) entre as energias E_{high} e E_{low} ; energias máxima e mínima para a solução da equação (3.2.1) respectivamente, parâmetros estes que são fornecidos pelo usuário.

Exemplos de $\Phi_f(E)$ são mostrados nas Figuras (3.2.1) e (3.2.2), onde foi considerado o urânio-238 como nuclide absorvedor e $T = 1500$ K. Considerando-se também $\beta = 0.0$ e $\sigma_{am} = 0.0$.

Pelos gráficos mostrados nas Figuras (3.2.1) e (3.2.2), foi observado que para o intervalo de energia de, aproximadamente, 0 a 400 eV, no caso do urânio-238 do ENDF/B-IV, encontra-se vários pontos em que o fluxo de nêutrons sofre quedas bruscas, sendo que em 6.67 eV há a maior queda de seu valor. Tais depressões ocorrem devido às ressonâncias existentes

PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

nesse intervalo de energia, que fazem com que os nêutrons que atinjam as energias de ressonâncias tenham grande probabilidade de serem absorvidos, e conseqüentemente, a diminuição do fluxo nessa região, fenômeno esse denominado de autoblindagem energética. Essa região de energia é chamada de **Região das Ressonâncias Resolvidas**. A autoblindagem energética é função da diluição (σ_0) e as quedas bruscas em $\Phi_f(E)$ é quanto maior quanto menor for σ_0 . Esse aspecto pode ser observado comparando as Figuras (3.2.1) e (3.2.2)

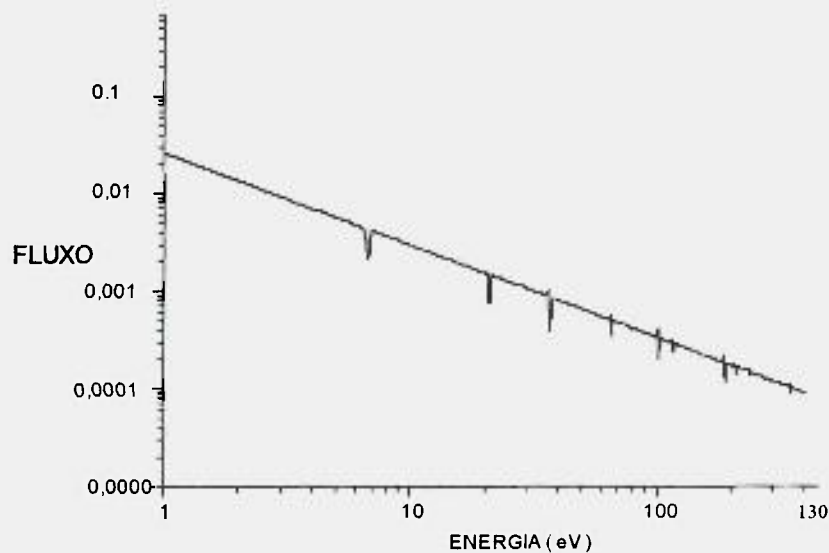


Figura 3.2.1 - Variação do fluxo de nêutrons em função da energia para uma diluição de $3.6E3$ barns, temperatura de 1500 K e energia entre 1 e 150 eV.

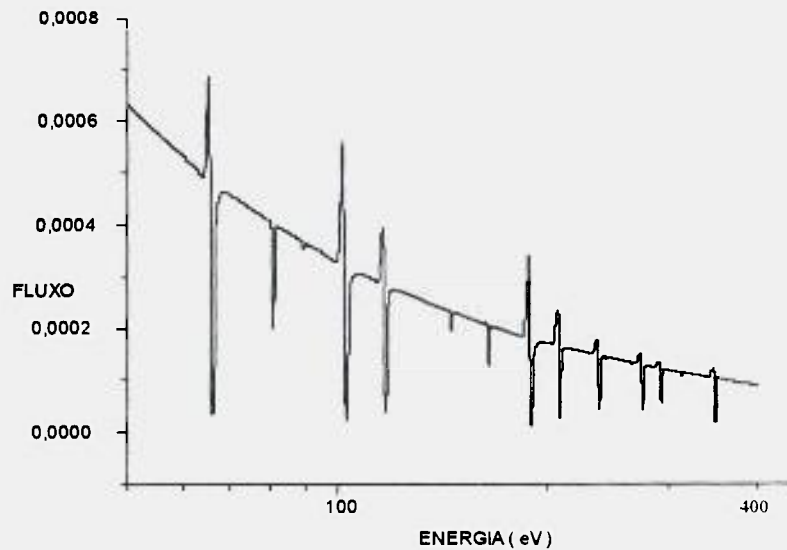


Figura 3.2.2 - Variação do fluxo de nêutrons em função da energia para uma diluição de 1.462×10^2 barns, temperatura de 1000 K e energia entre 50 e 400 eV.

Os picos presentes nas Figuras (3.2.1) e (3.2.2) representam o efeito da parte assimétrica da seção de choque de espalhamento elástico.

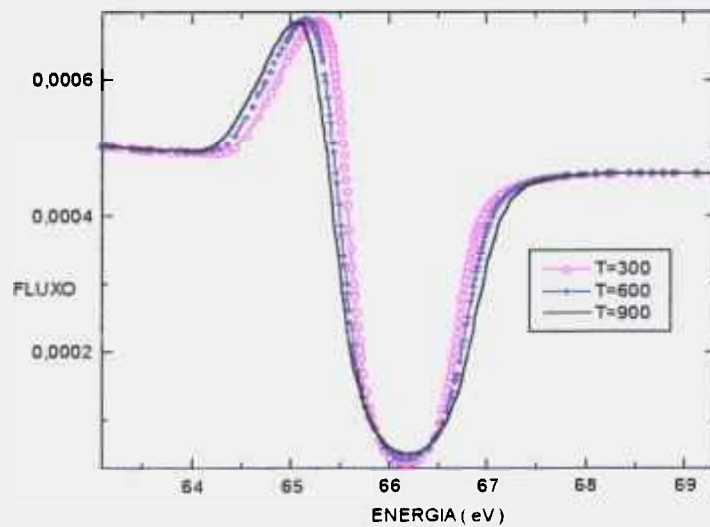


Figura 3.2.3 - Sobreposição das curvas do fluxo de nêutrons em função da energia segundo a variação de temperatura.

Quando sobrepõe-se as curvas para várias temperaturas conforme mostrado na Figura (3.2.3), tem-se que, para as temperaturas mais elevadas as ressonâncias são alargadas, isso significa que o intervalo de energia em que os nêutrons podem ser absorvidos aumenta. O efeito de alargamento das ressonâncias devido ao aumento da temperatura é chamado de **Efeito Doppler**⁵.

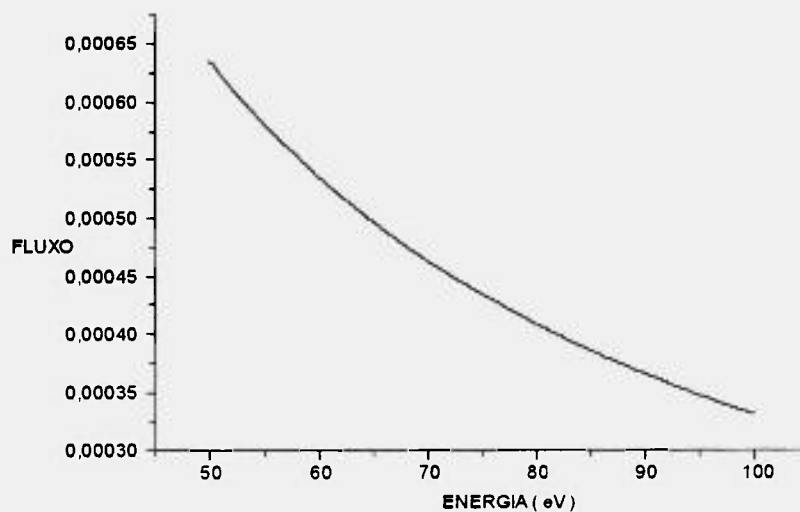


Figura 3.2.4 - Variação do fluxo de nêutrons em função da energia para uma diluição infinita.

Para “diluição infinita” ($\sigma_0=1E10$ barns) conforme mostrado na Figura (3.2.4), tem-se um comportamento do fluxo do tipo $1/E$, e independente da temperatura.

3.3 - OBTENÇÃO DAS INTEGRAIS DE MODERAÇÃO

Conforme o equacionamento apresentado no Capítulo 2, os parâmetros intermediários de ressonância são funções das integrais de moderação. Desta forma, as integrais de moderação são solucionadas utilizando o algoritmo do módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II⁶. A integral é calculada numericamente segundo

$$S_{i,j} = \sum_m \left\{ N_{j,m} \cdot \frac{1}{1 - \alpha_m} \int_{E_i}^{E/\alpha_m} [\Phi_j(E') \sigma_{s,m}(E')] \frac{dE'}{E'} \right\}, \quad \text{Eq.(3.3.1)}$$

onde m determina vários materiais com concentrações $N_{j,m}$, e efetua-se a aproximação

$$\Phi_j(E') \sigma_{s,m}(E') = \frac{(E' - E_L) \Phi_{j,L-1} \sigma_{s,m,L-1} + (E_{L-1} - E') \Phi_{j,L} \sigma_{s,m,L}}{E_{L-1} - E_L}, \quad \text{Eq.(3.3.2)}$$

onde E_{L-1} e E_L são os pontos no “grid” de energia compreendidos entre E e E/α . O diagrama abaixo ilustra quais são esses pontos considerados e a necessidade de interpolação para o ponto E/α que não necessariamente corresponderá a um dos pontos do “grid” de energia:

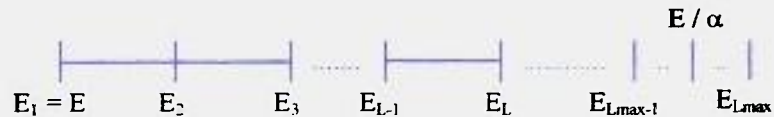


Figura 3.3.1 - Diagrama da energia

Substituindo-se a equação (3.3.2) na equação (3.3.1), isolando-se as constantes e calculando-se cada integral separadamente obtém-se

$$\int_E^{E/\alpha} \frac{\sigma_{sm}(E')\Phi(E')}{(1-\alpha_i)} \cdot \frac{dE'}{E'} \approx \frac{1}{1-\alpha_i} \sum_L \left\{ \Phi_{L-1} \sigma_{mL-1} \left[\frac{E_L}{E_L - E_{L-1}} \ln \left(\frac{E_L}{E_{L-1}} \right) - 1 \right] + \Phi_L \sigma_{ml} \left[\frac{E_{L-1}}{E_{L-1} - E_L} \ln \left(\frac{E_L}{E_{L-1}} \right) + 1 \right] \right\}$$

Eq.(3.3.3)

A equação anterior é codificada no programa para obtenção das integrais descritas pelas equações de (2.4.9) até (2.4.13).

O módulo de cálculo das integrais foi testado para se confirmar a exatidão dos resultados. Para esse propósito considere σ_s constante e $\Phi(E) = 1/E$. Inserindo na integral de moderação

$$XINT(E) = \int_E^{E/\alpha} \frac{\sigma_s \Phi(E')}{(1-\alpha)} \cdot \frac{dE'}{E'} = \sigma_s \int_E^{E/\alpha} \frac{1}{(1-\alpha)} \cdot \frac{dE'}{E'^2} = \frac{\sigma_s}{(1-\alpha)} \cdot \left\{ -\frac{\alpha}{E} + \frac{1}{E} \right\} = \frac{\sigma_s}{E}$$

Eq.(3.3.4)

portanto, tem-se

$$\frac{XINT(E) * E}{\sigma_s} = 1.0.$$

Eq.(3.3.5)

A condição imposta pela equação (3.3.5) foi testada para vários espalhadores para verificar a exatidão do procedimento numérico. Em todos os casos, obtém-se quatro dígitos de precisão.

Definindo

$$F(E) = \frac{XINT(E) * E}{\sigma_s} \quad \text{Eq.(3.3.6)}$$

onde XINT(E) agora representa a integral de moderação para $\sigma_s(E)$ e $\Phi_f(E)$ genérico, pode-se verificar se a integral de moderação está sendo calculada corretamente, pois, esta integral estará modulada ao valor 1.0.

Esse teste foi efetuado para vários espalhadores (vários valores de α) para verificar o algoritmo para o cálculo da integral de moderação.

Exemplos de F(E) para o Urânio-238 são mostrados nas Figuras (3.3.2), (3.3.3) e (3.3.4), considerando vários σ_0 's. Nesse caso, $\Phi_f(E)$ foi obtido com o sistema NJOY utilizando a opção "flux calculator".

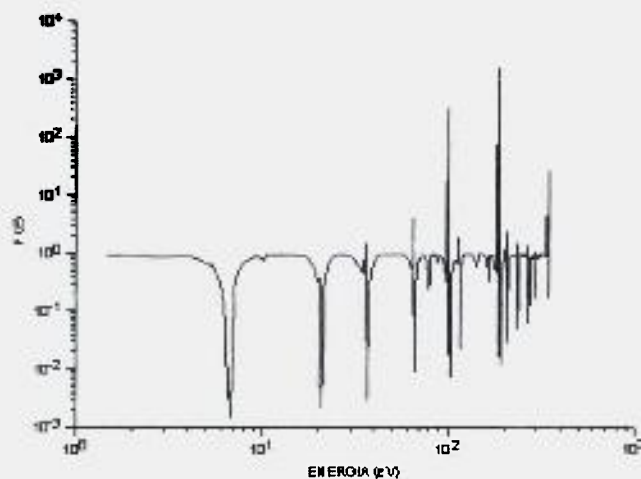


Figura 3.3.2 - F(E) para o Urânio-238 considerando $\sigma_0 = 5.0$ barns e T = 1500 K.

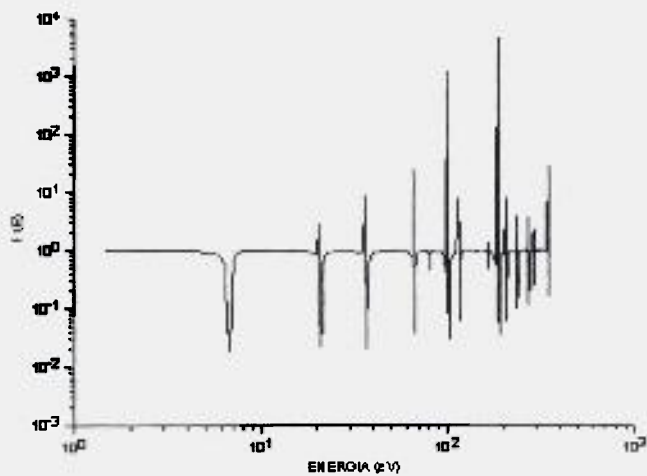


Figura 3.3.3 - $F(E)$ para o Urânio-238 considerando $\sigma_0 = 65.34$ barns e $T = 1500$ K.

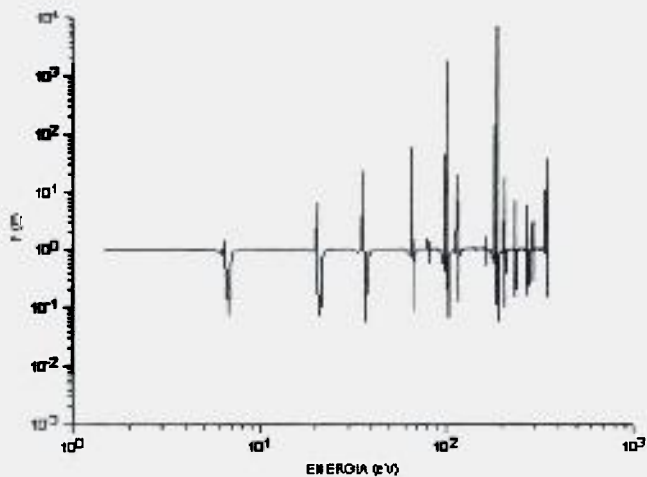


Figura 3.3.4 - $F(E)$ para o Urânio-238 considerando $\sigma_0 = 2.613E+02$ barns e $T = 1500$ K.

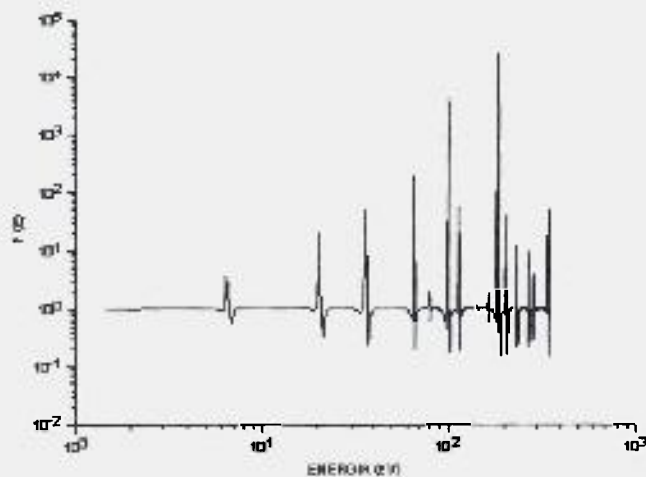


Figura 3.3.5 - $F(E)$ para o Urânio-238 considerando $\sigma_0 = 1E+10$ barns e $T = 1500$ K.

Na análise dos gráficos observa-se que, o valor da integral, independente do σ_0 , situa-se em torno de 1, em uma grande extensão da energia. Porém, nota-se que há vários "dips" e picos nos valores da integral devido as ressonâncias presentes na seção de choque de espalhamento e ao efeito de autoblindagem do fluxo. No caso de σ_0 's iguais a 5.0, 65.34 e 2E+02 barns, destaca-se a ressonância localizada em 6.67 eV. É observado também que conforme σ_0 aumenta, o "dip" em $F(E)$ diminui.

Já, no caso de $\sigma_0=1E+10$ barns (seção de choque de diluição infinita), observa-se que, apesar da grande incidência de "dips" e picos nos valores da integral, tais valores continuam ainda muito próximos a 1, mais próximos que para os valores de σ_0 citados anteriormente. A explicação para tal ocorrência vem do fato de que o fluxo de nêutrons para a diluição infinita tem a forma $1/E$ e o único efeito das ressonâncias na integral de espalhamento é devido à seção de choque de espalhamento elástico.

Considera-se, agora, a presença do oxigênio, como moderador, da mistura UO_2 . Para isto, o código NJOY foi novamente executado com a opção “flux calculator” com a seção de choque do oxigênio por átomo absorvedor fornecido como parâmetro de “input” constante e igual a duas vezes a seção de choque de espalhamento do oxigênio. O valor de α do oxigênio considerado foi de 0.7768. Figuras (3.3.6) e (3.3.7) mostram $F(E)$ para o oxigênio para vários σ_0 's. Os “dips” e os picos em $F(E)$ são devidos ao comportamento de $\Phi_f(E)$ o qual é extremamente influenciado pela presença das ressonâncias do urânio-238.

As Figuras (3.3.6) e (3.3.7) mostram o comportamento de $F(E)$ versus a energia para o oxigênio. Através da análise das Figuras (3.3.6) e (3.3.7), pode-se observar que $F(E)$ mostrado na equação (3.3.6) realmente é modulado próximo do valor 1 e mais uma vez os “dips” e picos apresentados nos gráficos são devidos ao comportamento do fluxo de nêutrons que é afetado pelas ressonâncias do urânio-238.

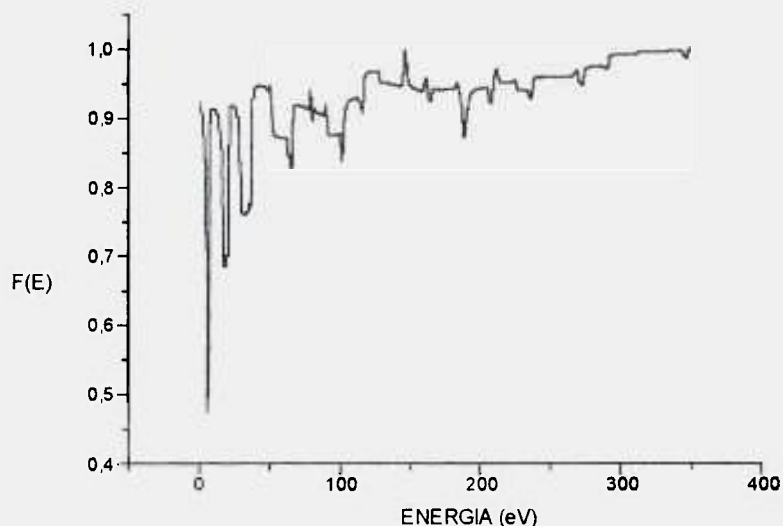


Figura 3.3.6 - $F(E)$ para o Oxigênio considerando $\sigma_0 = 50.0$ barns e $T = 1500$ K.

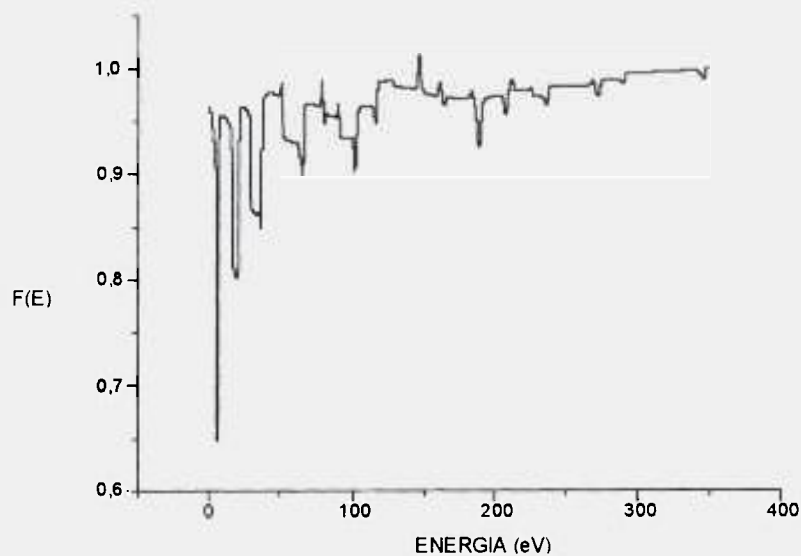


Figura 3.3.7 - F(E) para o Oxigênio considerando $\sigma_0 = 200,0$ barns e $T = 1500$ K.

Para o hidrogênio foi assumido $\Phi_1(E)=1.0/E$ para energias acima de E_{high} , devido ao baixíssimo valor de α_H e devido ao enorme volume de pontos de energia a serem considerados na integral. Dessa forma a equação (3.3.3) é utilizada entre energias E e E_{high} e, acima de E_{high} , a integral de moderação é efetuada analiticamente como :

$$\int_{E_{High}}^{E/\alpha_H} \frac{\sigma_{sH}}{(1-\alpha_H)} \cdot \frac{dE'}{E'^2} = \frac{\sigma_{sH}}{(1-\alpha_H)} \cdot \left(-\frac{1}{E'} \right) \Big|_{E_{High}}^{E/\alpha_H}$$

$$\int_{E_{High}}^{E/\alpha_H} \frac{\sigma_{sH}}{(1-\alpha_H)} \cdot \frac{dE'}{E'^2} = \frac{\sigma_{sH}}{(1-\alpha_H)} \left(\frac{1}{E_{High}} - \frac{\alpha_H}{E} \right) \quad \text{Eq.(3.3.7)}$$

As Figuras (3.3.8) e (3.3.9) ilustram o comportamento de $F(E)$ para o hidrogênio. Novamente é observado que os valores encontrados estão muito próximo a 1 e mais uma vez o fluxo de nêutrons é afetado pela ressonância presente espectro do urânio-238.

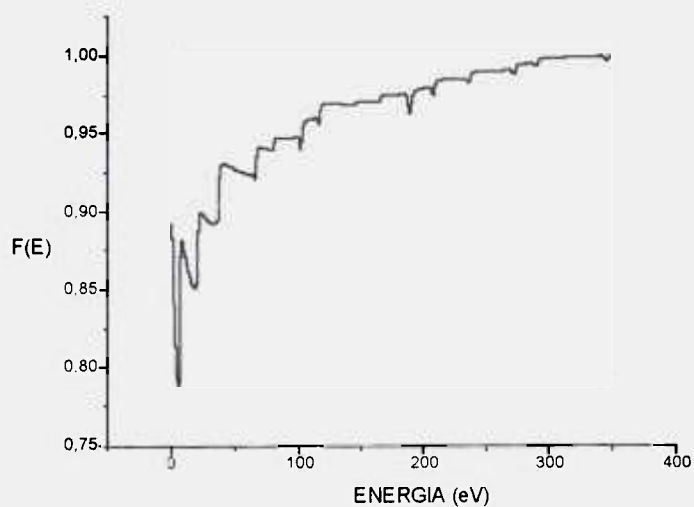


Figura 3.3.8 - $F(E)$ para o Hidrogênio considerando $\sigma_0 = 50.0$ barns e $T = 1500$ K.

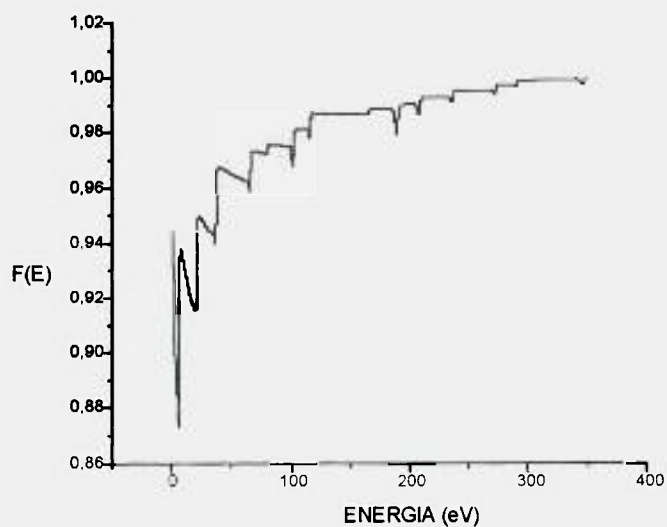


Figura 3.3.9 - $F(E)$ para o Hidrogênio considerando $\sigma_0 = 200.0$ barns e $T = 1500$ K.

As integrais expostas nas equações (2.4.9) e (2.4.13) foram calculadas pelo programa numericamente através de uma regra simples de cálculo de integrais, a regra do trapézio, dada por:

$$\int W dE \approx \sum_i \frac{W_{i+1} + W_i}{2} \cdot \Delta E_i,$$

onde

$$\Delta E_i = E_{i+1} - E_i,$$

sendo E_{i+1} e E_i pontos do “grid” de energia e W é uma função qualquer.

Dessa maneira foram calculados Z_f , W_f , Z_{am} , W_m e Z_m que são utilizados nas equações de (2.4.14) a (2.4.16) para o cálculo dos parâmetros intermediários de ressonância.

3.4 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 3

- 1 - MacFarlane, R. E., Muir, D.W., Boicourt, R.M., *The NJOY Nuclear Data Processing System, Vol-I: User's Manual*, Report LA-9393-M (1982).
- 2 - Lemmel, H. D., *ENDF/B-VI, The U. S. Evaluated Nuclear Data Library for Neutron Reaction Data*, IAEA-NDS-100, June (1990).
- 3 - Shibata, K., et alli, *Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 - JENDL-3*, JAERI - 1319 (1990).
- 4 - Schnuter, R.E., et alli, *ETOXS: A Code to Calculate Group Constants for Nuclear reactor Calculation*, BNWL-1002 (1962).
- 5 - Bell, G. I. and Glasstone, S., *Nuclear Reactor Theory*, Van Nostrand Reinhold Company, New York (1970).
- 6 - Greene, N.M. et alli, *AMPX-II: A Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron Gama Libraries from Data in ENDF Format*, PSR-63, Oak Ridge, Tennessee, (1978).

CAPÍTULO 4 - RESULTADOS OBTIDOS

4.1 - INTRODUÇÃO

4.2 - VERIFICAÇÃO DO PROCEDIMENTO PROPOSTO PARA O CÁLCULO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

4.3 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA PELO PROGRAMA ELABORADO EM REGIÃO DE MULTIGRUPO DE ENERGIA

4.4 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA UTILIZANDO A SUBROTINA GENFLX

4.5 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 4

CAPÍTULO 4 - RESULTADOS OBTIDOS

4.1 - INTRODUÇÃO

A verificação do equacionamento (Capítulo 2) e o programa elaborado para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância foi efetuado utilizando-se três problemas:

1 - Caso obtido da literatura^{1,2} onde a ressonância de 192 eV e de 6.7 eV do urânio-238 são descritas através do formalismo de Breit-Wigner³ para a temperatura de 0 K. Nesse caso, avaliou-se os resultados dos parâmetros intermediários de ressonância obtidos neste trabalho comparados com a literatura.

2 - Fluxos e seções de choque obtidos pelo NJOY⁴ para o urânio-238 nos grupos de energia 45 e 32 da estrutura de multigrupo da biblioteca epitérmica/rápida do código HAMMER-TECHNION⁵. Neste caso os λ 's e κ 's são obtidos em função de σ_0 (diluição) assumindo a aproximação de primeira ordem para $\Phi_f(E)$.

3 - Utilizando a subrotina GENFLX do código NJOY calculou-se os parâmetros intermediários de ressonância κ e μ em função da temperatura e σ_0 's, para os grupos de energia: 45, 41, 39, 36, 35, 34 e 32 da estrutura de grupo da biblioteca epitérmica/rápida do código HAMMER-TECHNION. A equação de moderação foi resolvida tendo como meio absorvedor o UO₂ (urânio-238 somente) e hidrogênio como moderador externo.

À seguir, as Seções subsequentes apresentam as considerações mais detalhadas para a obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância nos casos citados acima.

4.2 - VERIFICAÇÃO DO PROCEDIMENTO PROPOSTO PARA O CÁLCULO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA

Baseado nas considerações feitas anteriormente, elaborou-se um programa que utiliza tanto o fluxo exato obtido pela solução da equação (3.2.1) com o sistema NJOY, por exemplo, como também, o fluxo aproximado de primeira ordem.

A primeira avaliação, consiste na obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância utilizando o programa elaborado de forma similar a outros autores^{1,2}, utilizando a aproximação de 1ª ordem do fluxo e considerando as ressonâncias como isoladas e descritas pelo formalismo de Breit-Wigner³, para efeito de comparação do formalismo proposto.

Desta forma, foram calculados inicialmente os parâmetros intermediários de ressonância para a ressonância de 192 eV do urânio-238, considerando-se a não interferência de espalhamento. Os dados foram os mesmos usados por Ishiguro¹ e por Goldstein/Cohen² para a obtenção de λ e κ , para o meio UO₂. As seções de choque necessárias ao cálculo foram obtidas através de expressões analíticas dadas pelo formalismo de Breit-Wigner e codificadas no programa. Segue-se, agora, os dados utilizados²:

Tabela 4.2.1 - Dados relativos do urânio-238

T = 0 K	E ₁ = 200 eV	E ₂ = 180 eV	Γ _γ = 0.025 eV	σ ₁ = 11600 barns	α _{U-238} = 0.9832
μ = 1.0	E _r = 192 eV	Γ = 0.165 eV	Γ _n = 0.140 eV	σ _p = 10.0 barns	α _{C-16} = 0.7768

Por questão de simplicidade de análise e de disponibilidade de resultados para comparação com os resultados obtidos pelos autores citados, assumiu-se μ = 1.0; ou seja, o moderador externo foi considerado NR (Narrow Resonance).

No método numérico não é possível obter a integral no intervalo de (0, +∞), como é feito no método analítico, devido a isso, um intervalo de energia (E₁ e E₂) é escolhido, onde efetua-se as integrais para Z_f, W_f, Z_m, W_m, etc... Foram analisados em todos os casos, de

modo que, as ressonâncias ficassem devidamente isoladas e os resultados, a partir dele, tornem-se constante.

Os resultados para a ressonância de 192 eV do urânio-238 considerando o fluxo de 1ª ordem e os dados da Tabela (4.2.1) são apresentados na Tabela (4.2.2) em função da diluição (σ_0).

Tabela 4.2.2- Parâmetros IR para a ressonância de 192 eV a 0K.

σ_0 (barns)	Programa Elaborado		Ishiguro		Goldstein/Cohen	
	λ	κ	λ	κ	λ	κ
10	0.289	0.916	0.315	0.908	0.247	0.899
20	0.344	0.928	0.359	0.920	0.297	0.913
30	0.383	0.935	0.392	0.928	0.335	0.922
50	0.438	0.943	0.442	0.939	0.392	0.933
70	0.477	0.949	0.477	0.945	0.435	0.940
100	0.520	0.955	0.519	0.952	0.482	0.948

Com relação à Tabela (4.2.2) observa-se que para σ_0 pequenos, os valores de λ excedem 8% de desvio em relação aos dados de Ishiguro e 16% aos dados de Goldstein/Cohen, porém, à medida que σ_0 aumenta, o desvio diminui até 0.19% para Ishiguro e 7.47% para Goldstein/Cohen. O mesmo ocorre para o moderador, porém, com um desvio percentual muito inferior a λ , que se mostra um parâmetro muito difícil de ser obtido devido a forma analítica complexa da seção de choque de espalhamento elástica do absorvedor usada no cálculo dos parâmetros IR. Pode-se observar que os parâmetros intermediários de ressonância aproximam-se de 1 à medida que σ_0 aumenta, isto ocorre devido a tendência de $\Phi(E)$ tornar-se $1/E$, que é o fluxo na ausência de ressonâncias, ou seja, da aproximação NR (Narrow Resonance). Pode-se observar, também, que o parâmetro intermediário de ressonância κ é maior que λ , isto deve-se ao fato de $\alpha_{O-16} < \alpha_{U-238}$.

Além da ressonância descrita pela aproximação NR, 192 eV do urânio-238, considerou-se o caso oposto a aproximação WR representada pela ressonância de 6.7 eV do urânio-238, utilizando os seguintes dados² expostos na Tabela 4.2.3.

Tabela 4.2.3 - Dados para a ressonância de 6.7 eV do Urânio-238.

$T = 0 \text{ K}$	$E_1 = 18 \text{ eV}$	$E_2 = 2.0 \text{ eV}$	$\Gamma_\gamma = 0.026 \text{ eV}$	$\sigma_1 = 21530 \text{ barns}$	$\alpha_{U-238} = 0.9832$
$\mu = 1.0$	$E_r = 6.7 \text{ eV}$	$\Gamma = 0.02752 \text{ eV}$	$\Gamma_n = 0.00152 \text{ eV}$	$\sigma_p = 10.75 \text{ barns}$	$\alpha_{\sigma_0} = 0.7768$

Os resultados para a ressonância de 6.7 eV do urânio-238 considerando o fluxo de 1ª ordem e os dados da Tabela (4.2.3) apresentados na Tabela (4.2.4) em função da diluição (σ_0).

Tabela 4.2.4- Parâmetros IR para a ressonância de 6.7 eV a 0K.

σ_0 (barns)	Programa Elaborado		Ishiguro		Goldstein/Cohen	
	λ	κ	λ	κ	λ	κ
10	*	*	0.017	0.453	0.004	0.368
20	0.002	0.407	0.018	0.503	0.008	0.452
30	0.004	0.477	0.019	0.542	0.010	0.505
50	0.008	0.561	0.023	0.598	0.015	0.574
70	0.012	0.612	0.027	0.637	0.021	0.618
100	0.016	0.662	0.035	0.678	0.028	0.664

* - não atingiu a convergência.

Na Tabela (4.2.4) observa-se uma discrepância maior entre os resultados obtidos pelo programa, em comparação com os resultados dos dois autores em questão. Nota-se que os valores de λ diferem significativamente para um dado σ_0 , mesmo à medida que aumenta-se σ_0 . Entretanto nesse caso os valores de λ são muito próximos a zero, ou seja, a ressonância é considerada larga (WR) para espalhamento no Urânio-238. Para os valores de κ , nota-se que o desvio é grande para σ_0 pequeno, mas torna-se desprezível conforme σ_0

aumenta, principalmente em comparação com os valores de Goldstein/Cohen. Embora o desvio encontrado para λ seja grande, esse parâmetro é próximo de zero, o que não afetará sensivelmente o cálculo de autoblindagem. No cálculo de autoblindagem os parâmetros intermediários de ressonância se apresentam da seguinte forma⁶: $\lambda\sigma_p + \kappa\sigma_{am} + \mu \bar{A}s$. Como λ é próximo de zero e, além disso, nos cálculos de reatores térmicos típicos a maior contribuição na expressão acima provém do termo $\mu \bar{A}s$, o fato da discrepância encontrada para λ 's pequenos ser acentuada não implica em maiores consequências pois, sua contribuição no computo global será pequena.

Comparando-se os resultados das Tabelas (4.2.2) e (4.2.4), observa-se que os valores dos parâmetros intermediários de ressonância de 6.7 eV são menores que os valores para 192 eV. Isto ocorre porque é mais fácil atingir a condição NR (Narrow Resonance) para energias altas; ou seja, $\Gamma_p \ll (1-\alpha) E$ que é proporcional a energia (E).

4.3 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA PELO PROGRAMA ELABORADO EM REGIÃO DE MULTIGRUPO DE ENERGIA

Os parâmetros intermediários de ressonância foram avaliados na estrutura de multigrupo de energia utilizando-se como dados: as seções de choque total e de espalhamento do urânio 238 da biblioteca básica ENDF-B/IV e processadas com o código NJOY para $T = 1500$ K. Nesse caso é considerada a estrutura de grupo de energia da biblioteca epitérmica/rápida do código HAMMER-TECHNION⁵. Os grupos de energia estudados foram:

- grupo 45 ($E_1 = 8.315$ eV; $E_2 = 6.476$ eV), onde se encontra a ressonância de 6.67 eV;
- grupo 32 ($E_1 = 275.4$ eV; $E_2 = 167.0$ eV), onde se encontra a ressonância de 192 eV.

Os resultados foram obtidos através do diagrama do programa mostrado, pelo Capítulo 3, salvo que o fluxo utilizado para os cálculos dos parâmetros, não foi obtido através da subrotina GENFLX. A princípio, λ e κ , foram calculados através das equações (2.4.14) a (2.4.15) utilizando-se, como no método analítico, a aproximação de primeira ordem do fluxo. Uma vez mais considerando-se $\mu = 1.0$ e, os resultados são apenas para ilustrar a obtenção de λ no formalismo de multigrupo de energia. O cálculo foi realizado em multigrupos de energia e, alguns desses grupos podem conter uma ou mais ressonâncias, ou frações de ressonância. Foram analisados dois grupos de energia distintos de forma a observar situações opostas; o grupo 45 escolhido, contém apenas uma ressonância a de 6.67 eV, a ressonância não está completamente contida no intervalo do grupo 45 mas, também pertence ao grupo posterior, grupo 46. O grupo 32 escolhido, contém quatro ressonâncias, inclusive a maior que foi estudada, que é a de 192 eV.

A Figura (4.3.1) ilustra a seção de choque total no intervalo de energia compreendido pelo grupo 45 e a Figura (4.3.2) ilustra a seção de choque total no intervalo de energia compreendido pelo grupo 32.

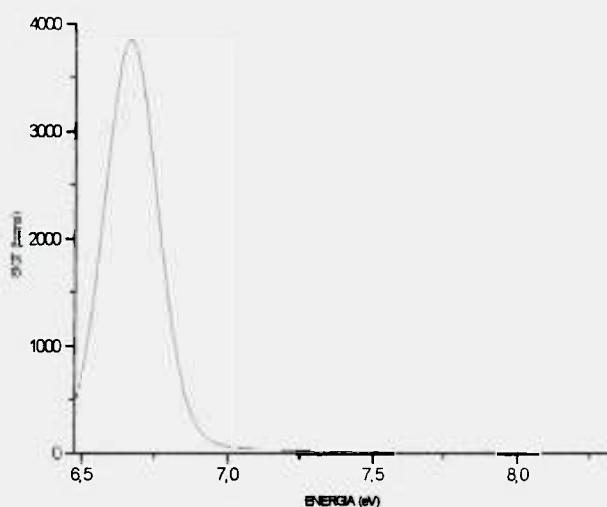


Figura 4.3.1 - Gráfico da seção de choque total do urânio-238 em função da energia no grupo 45.

A Figura (4.3.1) mostra o gráfico da seção de choque total do urânio-238 no intervalo de 6.476 a 8.315 eV. Nesse caso, o pico da ressonância apresenta-se na energia de 6.67 eV.

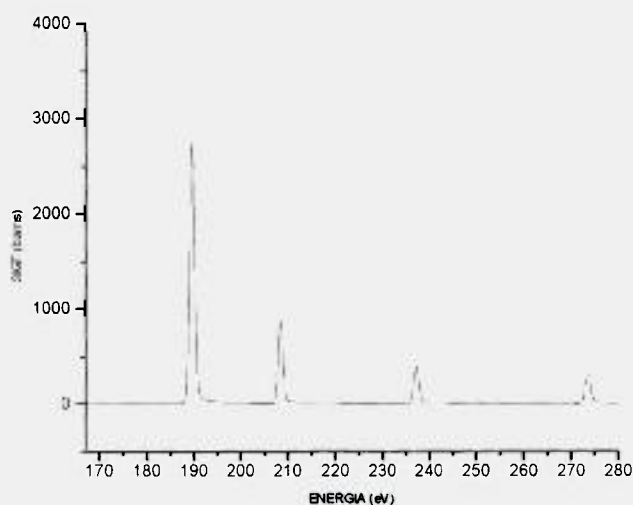


Figura 4.3.2 - Gráfico da seção de choque total do urânio-238 em função da energia no grupo 32.

A Figura (4.3.2) mostra o gráfico da seção de choque total do urânio-238 no intervalo de 167 a 275.4 eV. Neste caso, observa-se a presença de quatro ressonâncias, sendo que a mais pronunciada possui o pico na energia de 192 eV.

A Tabela (4.3.1) ilustra os resultados dos parâmetros λ e κ em função dos σ_0 's para os grupos de energia 45 e 32 do nuclídeo urânio-238.

Tabela 4.3.1 - Parâmetros IR para os grupos 45 e 32.

σ_0 (barns)	Grupo 45		Grupo 32	
	λ	κ	λ	κ
10	0.006	0.617	*	*
20	0.008	0.665	*	*
30	0.010	0.694	0.014	0.781
50	0.139	0.729	0.232	0.829
70	0.189	0.750	0.308	0.850
100	0.313	0.770	0.370	0.867

* - não atingiu a convergência.

Observa-se na Tabela (4.3.1) que os valores para os parâmetros IR tanto para o absorvedor como para o moderador estão dentro dos valores esperados, porém, para o grupo 32 com σ_0 inferiores a 26 barns, não se atingiu a convergência.

Deve ser observado que conforme σ_0 aumenta, λ e κ tendem a 1.0 (Narrow Resonance Approximation), isto porque uma vez mais o fluxo tende ao valor $1/E$ que é o fluxo na ausência de ressonâncias.

4.4 - OBTENÇÃO DOS PARÂMETROS INTERMEDIÁRIOS DE RESSONÂNCIA UTILIZANDO A SUBROTINA GENFLX

Na Tabela (4.4.1) estão especificados os grupos de energia e os respectivos intervalos de energia. Os grupos de energia especificados na Tabela (4.4.1) representam parte da estrutura de grupo da biblioteca epitérmica/rápida do código HAMMER-TECHNION, pois a estrutura completa contém 54 grupos de energia. A escolha deve-se ao fato de que futuramente os parâmetros intermediários de ressonância obtidos neste

trabalho serão incorporados no código HAMBOND que possui a mesma estrutura de energia da biblioteca epitérmica/rápida.

Tabela 4.4.1 - Estrutura dos grupos de energia.

GRUPO	Limite Inferior (eV)	Limite Superior (eV)
45	8.315	6.476
41	22.60	17.60
39	37.27	29.02
36	78.89	61.44
35	101.3	78.89
34	130.0	101.3
32	275.4	167.0

Para que os valores encontrados de κ e μ fossem considerados corretos, como mencionado anteriormente, a integral da taxa de reação de absorção no multigrupo utilizando o fluxo “exato” deve ser igual, ou aproximadamente igual à integral da taxa de reação de absorção no multigrupo utilizando o fluxo aproximado. Segundo a Seção 2.6 do Capítulo 2 essa afirmação somente será correta se a equação (2.6.14) for válida. A Tabela (4.4.2) ilustra os resultados obtidos para confirmar essa afirmação, onde:

$$\text{Int. } \Phi_f = \int_g K_f (\sigma_s \Phi_f) \Phi_f^{(1)}(E) E \sigma_a(E) dE,$$

e

$$\text{Int. } \Phi_f^{(1)} = \int_g K_f (\sigma_s \Phi_f^{(1)}) \Phi_f(E) E \sigma_a(E) dE.$$

Tabela 4.4.2 - Valores das integrais referentes à equação (2.6.14)
para $\beta = 0.4$ e $T = 1500$ K.

GRUPO	σ_0 (barns)	Int. Φ_f	Int. $\Phi_f^{(1)}$	DESVIO (%)
45	10	7.1970	7.2375	0.56
	50	31.649	31.727	0.25
	100	70.571	70.673	0.14
	200	175.81	175.91	0.06
41	10	8.3166	8.4110	1.13
	50	53.702	53.805	0.19
	100	138.94	138.99	0.04
	200	378.47	378.29	0.05
39	10	11.696	11.682	0.12
	50	94.772	94.531	0.25
	100	252.85	252.30	0.22
	200	681.33	680.06	0.19
36	10	7.9781	8.0430	0.81
	50	41.126	41.127	0.002
	100	93.603	93.532	0.08
	200	216.36	216.14	0.10
35	10	3.6387	3.5327	2.91
	50	10.161	9.9993	1.60
	100	15.088	14.888	1.34
	200	21.319	21.049	1.27
34	10	13.505	13.580	0.55
	50	58.352	58.349	0.005
	100	123.35	123.27	0.06
	200	265.54	265.31	0.09
32	10	13.485	13.474	0.08
	50	42.253	42.210	0.10
	100	75.972	75.901	0.09
	200	139.40	139.29	0.08

Segundo os resultados apresentados na Tabela (4.4.2), a equação (2.6.14) está sendo calculada dentro de uma precisão satisfatória. Os resultados mostram que os desvios entre a integral referente à taxa de reação do fluxo “exato” e fluxo aproximado são relativamente pequenos e apenas no grupo 35 todos os valores excedem 1% e, no grupo 41 o desvio para 10 barns também excede 1%.

A Tabela (4.4.3) ilustra agora, os resultados obtidos para a confirmação da igualdade entre as integrais da taxa de reação de absorção no multigrupo utilizando o fluxo “exato” e o fluxo aproximado.

Tabela 4.4.3 - Valores das integrais do fluxo “exato” e do fluxo aproximado para $\beta = 0.4$ e $T = 1500$ K.

GRUPO	σ_0 (barns)	INT. EXATA	INT. APROX.	DESVIO (%)
45	10	1.6774	1.6512	1.56
	50	4.7541	4.7344	0.41
	100	7.8342	7.8138	0.26
	200	13.091	13.069	0.17
41	10	1.3417	1.3207	1.56
	50	3.3759	3.3597	0.48
	100	5.2125	5.1971	0.29
	200	8.1712	8.1556	0.19
39	10	0.9085	0.8874	2.32
	50	2.1526	2.1339	0.87
	100	3.2612	3.2431	0.56
	200	5.0390	5.0204	0.40
36	10	0.5513	0.5554	0.74
	50	1.2035	1.2011	0.20
	100	1.7718	1.7686	0.18
	200	2.6371	2.6337	0.13
35	10	0.4230	0.4095	3.19
	50	0.7116	0.7073	0.60
	100	0.8720	0.8691	0.33
	200	1.0278	1.0257	0.20
34	10	0.6380	0.6452	1.13
	50	1.3340	1.3330	0.07
	100	1.9322	1.9308	0.07
	200	2.8167	2.8156	0.04
32	10	0.6913	0.6828	1.23
	50	1.2144	1.2120	0.20
	100	1.6279	1.6266	0.08
	200	2.1833	2.1827	0.03

Pode-se observar através da Tabela (4.4.3) que os valores encontrados para as integrais da taxa de reação de absorção no multigrupo utilizando-se o fluxo “exato” e o fluxo aproximado de primeira ordem são muito próximos um ao outro. Isso demonstra a consistência nos cálculos dos parâmetros intermediários de ressonância, como é sugerido na Seção 2.4 através da equação (2.4.17).

Pelas avaliações iniciais efetuadas nas Seções 4.2 e 4.3, observou-se a dificuldade na obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância para o nuclídeo absorvedor λ , devido a forma complexa da seção de choque total e de espalhamento elástico. Entretanto,

conforme exposto no Capítulo 2 essa complexidade é desnecessária no cálculo espectral utilizado em vários códigos celulares, visto que, o efeito da ressonância ser intermediária já foi levado em consideração na elaboração das bibliotecas de seções de choque.

Os resultados e análises dessa Seção são relativos à obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância utilizando os fluxos da subrotina GENFLX que é o procedimento comumente utilizado para a preparação de bibliotecas de seções de choque em códigos celulares que utilizam o método de autoblindagem. Desta forma, o fluxo utilizado para o cálculo dos parâmetros intermediários de ressonância é obtido através da subrotina GENFLX incorporada ao programa.

Os cálculos foram realizados para o oxigênio e para o hidrogênio, tendo em vista que o parâmetro intermediário de ressonância para o urânio-238 já está sendo considerado na elaboração da biblioteca de dados nucleares. Assim sendo, foram fornecidos ao programa os arquivos de seções de choque total e de espalhamento elástico do urânio-238 da biblioteca básica ENDF/B-IV e processadas com o código NJOY, assim como, o arquivo de fluxo (saída do módulo GROUPE), os grupos de energia de interesse e a diluição do sistema. O efeito de temperatura estará implícito tanto nas seções de choque como no fluxo de nêutrons.

Os parâmetros intermediários de ressonância foram obtidos em função das diluições típicas encontradas em reatores térmicos: 10, 50, 70, 100 e 200 barns; para temperaturas variando de 0, 300, 600 e 1500 K. Para as três primeiras temperaturas o valor de β utilizado foi igual a 0.4 e, para 1500 K os valores de β variaram de 0.4, 0.5 e 0.6, para que se pudesse verificar qual a influência de β nos resultados obtidos.

Desta forma, a contribuição do efeito da temperatura no parâmetro intermediário de ressonância κ são apresentados nas Tabelas (4.4.4) a (4.4.10) para o valor de β constante, $\beta = 0.4$, em função de σ_0 e T nos grupos de energia apresentados na Tabela (4.4.1).

Tabela 4.4.4 - Valores de κ para o grupo 45.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.5415	0.7101	0.7631	0.8072
300	0.5409	0.7115	0.7643	0.8069
600	0.5411	0.7117	0.7630	0.8027

Tabela 4.4.5 - Valores de κ para o grupo 41.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.5077	0.7251	0.7901	0.8422
300	0.5072	0.7291	0.7955	0.8469
600	0.5073	0.7303	0.7953	0.8438

Tabela 4.4.6 - Valores de κ para o grupo 39.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.5291	0.7158	0.7805	0.8353
300	0.5270	0.7200	0.7866	0.8414
600	0.5241	0.7218	0.7888	0.8416

Tabela 4.4.7 - Valores de κ para o grupo 36.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.6103	0.8113	0.8687	0.9114
300	0.5934	0.8077	0.8658	0.9065
600	0.5942	0.8081	0.8625	0.9003

Tabela 4.4.8 - Valores de κ para o grupo 35.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.2254	0.7454	0.8546	0.9132
300	0.4502	0.8038	0.8641	0.8916
600	0.4426	0.7793	0.8356	0.8582

Tabela 4.4.9 - Valores de κ para o grupo 34.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.6324	0.8127	0.8704	0.9128
300	0.6646	0.8384	0.8866	0.9197
600	0.6854	0.8440	0.8859	0.9151

Tabela 4.4.10 - Valores de κ para o grupo 32.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	*	0.7909	0.8744	0.9199
300	0.4972	0.8563	0.9087	0.9373
600	0.5688	0.8561	0.9038	0.9306

* - não atingiu a convergência

Os valores de κ das Tabelas (4.4.4) a (4.4.10) demonstram a pequena dependência deste parâmetro com a temperatura, e na maioria dos casos o valor diminui à medida que a temperatura aumenta. O efeito oposto é observado no valor de κ quando σ_0 aumenta, observando a maior variação na faixa de σ_0 entre 10 e 50 barns.

As Tabelas (4.4.11) a (4.4.17) ilustram os valores para o parâmetro intermediário de ressonância para o moderador externo μ para os mesmos grupos de energia, temperaturas e valor $\beta = 0.4$ considerados anteriormente no parâmetro κ .

Tabela 4.4.11 - Valores de μ para o grupo 45.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.6756	0.8488	0.8878	0.9155
300	0.6717	0.8477	0.8871	0.9143
600	0.6694	0.8465	0.8854	0.9116

Tabela 4.4.12 - Valores de μ para o grupo 41.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.6715	0.8320	0.8867	0.9186
300	0.6649	0.8428	0.8881	0.9204
600	0.6608	0.8416	0.8869	0.9183

Tabela 4.4.13 - Valores de μ para o grupo 39.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.7405	0.8745	0.9085	0.9341
300	0.7293	0.8709	0.9071	0.9338
600	0.7211	0.8679	0.9054	0.9323

Tabela 4.4.14 - Valores de μ para o grupo 36.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.7594	0.8922	0.9273	0.9520
300	0.7576	0.8996	0.9339	0.9561
600	0.7586	0.9004	0.9326	0.9533

Tabela 4.4.15 - Valores de μ para o grupo 35.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.6077	0.8684	0.9222	0.9222
300	0.7142	0.8982	0.9297	0.9444
600	0.7030	0.8832	0.9138	0.9270

Tabela 4.4.16 - Valores de μ para o grupo 34.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	0.8126	0.9159	0.9429	0.9616
300	0.8315	0.9299	0.9534	0.9686
600	0.8389	0.9312	0.9526	0.9668

Tabela 4.4.17 - Valores de μ para o grupo 32.

TEMPERATURA (K)	10 barns	50 barns	100 barns	200 barns
0	*	0.9268	0.9552	0.9707
300	0.8479	0.9549	0.9738	0.9824
600	0.8690	0.9578	0.9723	0.9804

* - não atingiu a convergência

Para o parâmetro intermediário de ressonância μ observa-se pelas Tabelas (4.4.11) a (4.4.17) que até o grupo 35 os valores diminuem à medida que a temperatura aumenta, porém, nos grupos posteriores esses valores aumentam um pouco à medida que a temperatura aumenta mesmo sendo muito pequena a diferença entre os valores encontrados. Novamente, observa-se que os valores de μ aumentam conforme aumenta σ_0 , aproximando-se do valor 1 (aproximação NR).

Os resultados apresentados evidenciam que a temperatura influencia pouco nos valores dos parâmetros intermediários de ressonância, tanto para o moderador presente na

mistura como para o moderador externo. Também, observa-se que os valores de κ e μ se aproximam de 1 à medida que aumenta σ_0 . Isto vem a ocorrer porque $\Phi(E)$ tende a $1/E$, que é o comportamento de $\Phi(E)$ para a aproximação NR (Narrow Resonance). Pode-se observar, ainda, que os valores de ambos os parâmetros intermediários de ressonância tornam-se mais próximos de 1 conforme aumenta a energia do grupo.

Os valores de μ das Tabelas (4.4.11) a (4.4.17) são maiores que os valores do correspondente κ para as mesmas diluições, temperaturas e β 's pois, o hidrogênio (moderador externo) possui o valor de α menor que o oxigênio, dessa forma aproxima-se mais da condição NR (Narrow Resonance).

Igualmente ao caso do parâmetro κ , os valores de μ são mais dependentes da diluição do que da temperatura, observando-se a maior variação no intervalo de σ_0 de 10 a 50 barns.

A Tabela (4.4.18) ilustra os resultados dos parâmetros intermediários de ressonância κ e μ em função do valor de β e de σ_0 para a $T = 1500$ K nos grupos de energia citados na Tabela (4.3.1).

Tabela 4.4.18 - Valores obtidos para κ e μ para $T = 1500$ K
variando-se o valor de β .

GRUPO	σ_0 (barns)	κ			μ		
		$\beta=0.4$	$\beta=0.5$	$\beta=0.6$	$\beta=0.4$	$\beta=0.5$	$\beta=0.6$
45	10	0.5405	0.5128	0.4806	0.6628	0.6335	0.6017
	20	0.6225	0.6010	0.5751	0.7591	0.7361	0.7101
	30	0.6633	0.6451	0.6228	0.8005	0.7810	0.7587
	50	0.7075	0.6927	0.6744	0.8405	0.8249	0.8067
	70	0.7322	0.7194	0.7033	0.8607	0.8474	0.8316
	100	0.7549	0.7437	0.7297	0.8784	0.8668	0.8532
	200	0.7896	0.7810	0.7701	0.9032	0.8945	0.8841
41	10	0.5083	0.4836	0.4586	0.6532	0.6349	0.6165
	20	0.6180	0.5972	0.5754	0.7485	0.7330	0.7170
	30	0.6711	0.6531	0.6338	0.7924	0.7791	0.7649
	50	0.7274	0.7127	0.6968	0.8366	0.8258	0.8142
	70	0.7578	0.7457	0.7318	0.8595	0.8505	0.8404
	100	0.7865	0.7757	0.7636	0.8802	0.8722	0.8635
	200	0.8289	0.8208	0.8117	0.9095	0.9037	0.8972
39	10	0.5123	0.4924	0.4729	0.7023	0.6880	0.6738
	20	0.6094	0.5933	0.5770	0.7840	0.7722	0.7602
	30	0.6603	0.6466	0.6324	0.8216	0.8115	0.8011
	50	0.7180	0.7070	0.6954	0.8601	0.8520	0.8436
	70	0.7508	0.7420	0.7320	0.8804	0.8739	0.8666
	100	0.7826	0.7747	0.7661	0.8990	0.8933	0.8872
	200	0.8307	0.8251	0.8188	0.9260	0.9219	0.9176
36	10	0.5962	0.8174	0.5639	0.7590	0.9072	0.7421
	20	0.7019	0.6886	0.6750	0.8316	0.8244	0.8172
	30	0.7503	0.7390	0.7273	0.8640	0.8579	0.8516
	50	0.7991	0.7901	0.7807	0.8954	0.8905	0.8855
	70	0.8248	0.8174	0.8093	0.9112	0.9072	0.9028
	100	0.8481	0.8417	0.8347	0.9251	0.9215	0.9178
	200	0.8827	0.8779	0.8728	0.9445	0.9420	0.9392
35	10	0.3603	0.3402	0.3266	0.6492	0.6402	0.6347
	20	0.5339	0.5147	0.4992	0.7468	0.7379	0.7311
	30	0.6157	0.5987	0.5840	0.7921	0.7842	0.7776
	50	0.6897	0.6753	0.6620	0.8333	0.8266	0.8205
	70	0.7205	0.7088	0.6962	0.8509	0.8455	0.8398
	100	0.7436	0.7315	0.7197	0.8645	0.8589	0.8536
	200	0.7564	0.7453	0.7340	0.8744	0.8694	0.8644

Continuação da Tabela 4.4.18:

GRUPO	σ_0 (barns)	κ			μ		
		$\beta=0.4$	$\beta=0.5$	$\beta=0.6$	$\beta=0.4$	$\beta=0.5$	$\beta=0.6$
34	10	0.7179	0.7082	0.6981	0.8504	0.8461	0.8418
	20	0.7869	0.7792	0.7712	0.8938	0.8902	0.8866
	30	0.8167	0.8103	0.8035	0.9125	0.9094	0.9063
	50	0.8466	0.8415	0.8361	0.9307	0.9282	0.9256
	70	0.8626	0.8583	0.8536	0.9401	0.9380	0.9358
	100	0.8772	0.8735	0.8696	0.9485	0.9467	0.9447
	200	0.8998	0.8971	0.8942	0.9608	0.9595	0.9581
32	10	0.6172	0.6132	0.6107	0.8824	0.8814	0.8808
	20	0.7415	0.7381	0.7353	0.9213	0.9203	0.9196
	30	0.7947	0.7919	0.7893	0.9380	0.9372	0.9365
	50	0.8437	0.8414	0.8393	0.9534	0.9527	0.9522
	70	0.8672	0.8654	0.8635	0.9607	0.9602	0.9597
	100	0.8867	0.8851	0.8835	0.9668	0.9664	0.9659
	200	0.9131	0.9119	0.9107	0.9750	0.9747	0.9744

A Tabela (4.4.18) mostra que a variação no valor de β influencia pouco nos parâmetros intermediários de ressonância κ e μ , porém observa-se que quanto maior o valor de β menor serão os valores de κ e μ . As Figuras (4.4.1) a (4.4.4) ilustram o comportamento dos parâmetros em função dos σ_{01} 's para os grupos 32 e 45. Com relação às figuras pode ser observado que os parâmetros intermediários de ressonância atinge-se maiores valores nos grupos de energia onde as energias são mais altas, visto que, a condição NR (Narrow Resonance) é mais facilmente atingida. Além disso, observa-se a maior variação dos parâmetros em função do β para grupos de energia menor.

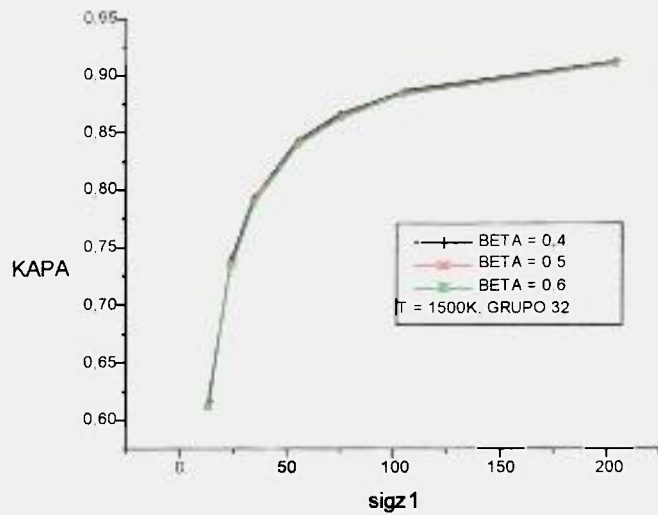


Figura 4.4.1 - Gráfico do parâmetro κ em função de σ_{01} com variações de β para o grupo de energia 32.

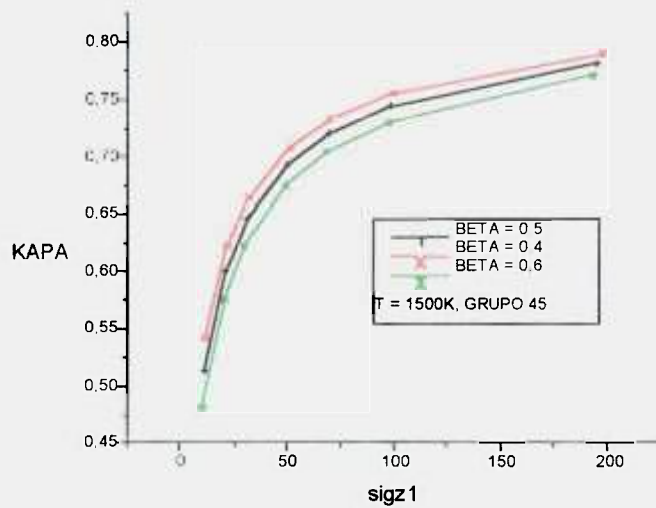


Figura 4.4.2 - Gráfico do parâmetro κ em função de σ_{01} com variações de β para o grupo de energia 45.

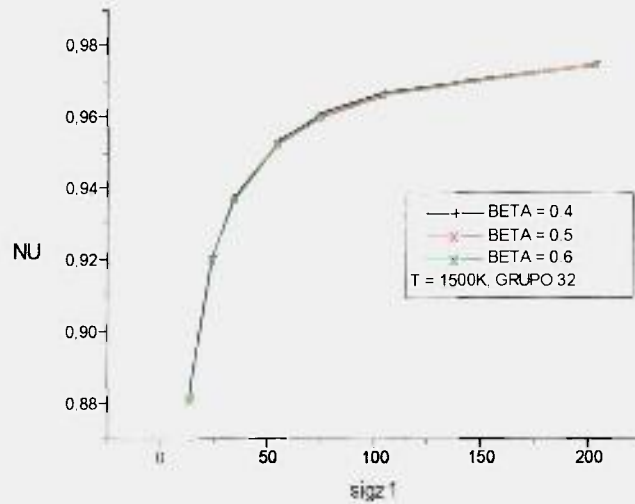


Figura 4.4.3 - Gráfico do parâmetro μ em função de σ_{01} com variações de β para o grupo de energia 32.

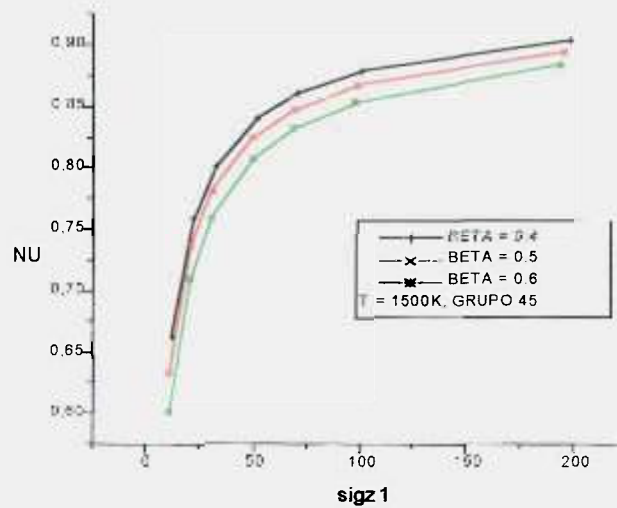


Figura 4.4.4 - Gráfico do parâmetro μ em função de σ_{01} com variações de β para o grupo de energia 45.

Com relação aos resultados para este caso observa-se, de forma geral, a consistência no comportamento dos parâmetros intermediários de ressonância em função das variáveis energia, temperatura, diluição e β .

4.5 - REFERÊNCIAS DO CAPÍTULO 4

- 1 - Ishiguro, Y., Exact Treatment of the Resonance Absorption of Neutrons of Intermediate Energy, Journal Nucl. Sci. Technol., 32, 422 (1968).
- 2 - Goldstein, R. and Cohen, E.R., Theory of Resonance Absorption of Neutrons, Nuclear Sci. and Eng., 13, 132 (1962).
- 3 - Breit, G. and Wigner, E.P., Capture of Slow Neutrons, Phys. Rev., 49, 519 (1936).
- 4 - MacFarlane, R. E., Muir, D.W., Boicourt, R.M., The NJOY Nuclear Data Processing System, Vol-I: User's Manual, Report LA-9393-M (1982).
- 5 - Abe, A. Y. e Santos, A., Implementação do Método de Bondarenko para o Tratamento da Autoblindagem do Código HAMMER-TECHNION, Anais do IX ENFIR - Caxambú, M.G., Outubro (1993).
- 6 - - Williams, M.L., Wright, R.Q., Barhen, J., Rothenstein, W. and Toney, B., Benchmarking of Epithermal Methods in the Lattice Physics Code EPRI-CELL, Proceedings: Thermal Reactor Benchmark Calculations, Techniques, Results, and Applications, Brookhaven National Lab., Upton, NY(USA), (Feb. 1983).

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

5.1 - CONCLUSÕES

5.2 - RECOMENDAÇÕES

CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

5.1 - CONCLUSÕES

A determinação dos parâmetros intermediários de ressonância no formalismo de multigrupo partindo do equacionamento básico e o subsequente desenvolvimento de um algoritmo numérico foi avaliado num espectro de problemas típicos encontrados em reatores térmicos.

A avaliação inicialmente abrangeu desde um caso simples da literatura até um caso mais elaborado onde os parâmetros intermediários de ressonância são funções da temperatura, da diluição e energia. Do ponto de vista de utilização do fluxo considerado “exato” nas equações para a determinação dos parâmetros intermediários de ressonância, esse trabalho é o primeiro a utilizar esse procedimento, embora, outros autores considerem aproximações de ordem superior que supostamente convirjam às soluções “exatas”.

O primeiro caso estudado baseou-se em estudos de autores conhecidos como Ishiguro e Goldstein/Cohen onde as ressonâncias foram consideradas isoladas e os parâmetros intermediários de ressonância foram calculados para as energias de ressonância de 6.7 e 192 eV do urânio-238. No segundo caso, os parâmetros intermediários de ressonância foram calculados utilizando o fluxo de primeira ordem para os multigrupos 32 e 45 do HAMMER-TECHNION. Finalmente, o último caso consistiu na obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância para uma estrutura de multigrupo de energia utilizando o fluxo “exato” proveniente da subrotina GENFLX do código NJOY e a compatibilização com o cálculo das seções de choque de multigrupo. A seguir, serão apresentadas as avaliações e conclusões dos resultados obtidos.

Inicialmente, para o primeiro caso os valores encontrados para os parâmetros intermediários de ressonância, através da utilização do método proposto por autores como Ishiguro e Goldstein/Cohen, os resultados são concordantes e, foram encontrados valores esperados segundo os mesmos autores, com uma margem de desvio satisfatória.

Para o segundo caso, observa-se que os valores para a região de 6.67 eV tem valores esperados, tanto para o absorvedor, como para o moderador. Já para a obtenção dos valores dos parâmetros IR no grupo 32, não foi atingida a convergência imposta para as seções de choque inferiores a 26 barns, porém para seções de choque maiores o resultado foi satisfatório.

No último caso foi avaliado inicialmente as integrais das taxas de reação de absorção no multigrupo utilizando o fluxo “exato” e fluxo aproximado. Este cálculo serviu para verificar a precisão do método proposto e o programa elaborado para o cálculo numérico dos parâmetros intermediários de ressonância. Os resultados obtidos mostram que, o valor da integral da taxa de reação de absorção no multigrupo com o fluxo “exato” é muito próximo do valor da integral da taxa de reação de absorção no multigrupo com o fluxo aproximado, apresentando desvios aceitáveis comparados aos da literatura onde Chiovato apresenta desvios de até 4.69 % e Mizuta e Yamamoto também apresentam desvios nessa ordem de grandeza. Foi observado que, os desvios entre os resultados diminuem consideravelmente à medida que a energia do grupo e a diluição do sistema aumentam. A convergência dos valores para uma diluição de 10 barns, foi consideravelmente mais difícil de ser obtida, principalmente para os grupos 45, 41 e 39 onde encontram-se as menores energias da estrutura de grupo considerada.

Foram calculados os parâmetros intermediários de ressonância para o moderador presente na mistura absorvedora (oxigênio) e moderador externo (hidrogênio). Desta forma, os parâmetros intermediários de ressonância do moderador presente na mistura absorvedora (κ) e do moderador externo (μ), foram calculados primeiramente para as diluições 10, 50, 100 e 200 barns e variações de temperaturas de 0, 300 e 600 K, para os grupos de energia 45, 41, 39, 36, 35, 34 e 32. Os resultados obtidos mostram que os valores dos parâmetros κ e μ aumentam consideravelmente em relação ao aumento da

diluição do sistema, independente do grupo de energia. Porém, os valores encontrados em relação à variação temperatura do sistema, possuem uma pequena variação na maioria dos casos. É observado, também, que o parâmetro μ aproxima-se mais do valor 1.0 do que κ .

Posteriormente, os parâmetros intermediários de ressonância κ e μ foram analisados em função da variação do valor de β . Os parâmetros foram calculados para uma temperatura de 1500 K, com diluições variando de 10, 20, 30, 50, 70, 100 e 200 barns e com variações de β de 0.4, 0.5 e 0.6. Os resultados obtidos mostram que para os menores valores de β , maiores são os valores de ambos os parâmetros intermediários de ressonância, porém a variação entre esses valores é muito pequena. Entretanto, a variação dos valores dos parâmetros κ e μ em função da diluição do sistema mostra-se, novamente mais pronunciada, aumentando à medida que a diluição tende a valores maiores, o que confirma que σ_0 é o fator mais importante na obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância.

Conforme as Figuras (4.4.1) a (4.4.4.) apresentadas, fica evidenciada a contribuição da diluição do sistema nos parâmetros intermediários de ressonância, e pode ser observado que para diluições entre 10 e aproximadamente 50 barns os valores caem bruscamente, tanto para κ como para μ .

De forma geral, os resultados obtidos para os casos analisados foram satisfatórios e concordantes, com exceção dos casos não convergidos.

5.2 - RECOMENDAÇÕES

Como trabalho futuro, recomenda-se inicialmente uma análise mais detalhada dos parâmetros intermediários de ressonância nos casos onde não se verificou a convergência. Do ponto de vista de obtenção dos parâmetros intermediários de ressonância, um estudo interessante seria a análise do caso onde considera-se Q no lugar de β na equação (2.5.21) e procede-se como na Seção 2.6. Dessa forma, não haverá as aproximações mencionadas no trabalho para a compatibilização com o NJOY. Entretanto, a solução “exata” $\Phi_f(E)$ dependerá de μ através de Q . Nesse caso, deve-se modificar a subrotina GENFLX para resolver ambos os casos; solução “exata” e solução aproximada e recorrer a um processo iterativo, nesse caso mais amplo, atualizando Q a cada iteração. Também, deve-se avaliar os parâmetros intermediários de ressonância para outros sistemas tais como ThO_2 ; e posteriormente, uma análise através de um cálculo utilizando os parâmetros intermediários de ressonância num código de cálculo espectral tal como HAMBOND.

Finalmente, recomenda-se uma análise de sensibilidade a fim de avaliar a influência dos parâmetros intermediários de ressonância nos sistemas acima citados.