

INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR

DESIRÉE YAEL DE SENA TAVARES

**CÁLCULO DE CÉLULA COM SIMULAÇÃO DE QUEIMA USANDO O CÓDIGO
WIMSD-5B CONSIDERANDO DIFERENTES BIBLIOTECAS DE DADOS
NUCLEARES**

Rio de Janeiro

2017

DESIRÉE YAEL DE SENA TAVARES

**CÁLCULO DE CÉLULA COM SIMULAÇÃO DE QUEIMA USANDO O CÓDIGO
WIMSD-5B CONSIDERANDO DIFERENTES BIBLIOTECAS DE DADOS
NUCLEARES**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares do Instituto de Engenharia Nuclear da Comissão Nacional de Engenharia Nuclear como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciência e Tecnologia Nucleares.

Orientador: Prof. Dr. Zelmo Rodrigues de Lima (PPGCTN/IEN/CNEN)

Rio de Janeiro

2017

TAVAR. Sena Tavares, Desirée Y.

Cálculo de Célula com Simulação de Queima Usando o Código WIMSD-5B Considerando Diferentes Bibliotecas de Dados Nucleares / Desirée Yael de Sena Tavares - Rio de Janeiro: CNEN / IEN, 2017.

xviii, 112f.: il.; 35 cm

Orientador: Zelmo Rodrigues de Lima.

Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Nucleares com ênfase em Engenharia de Reatores) - Instituto de Engenharia Nuclear, PPGCTN/IEN, 2017.

1. Reatores Nucleares. 2. Cálculo de Células. 3. WIMSD-5B. 4. Queima. 5. Bibliotecas de Dados Nucleares.

**CÁLCULO DE CÉLULA COM SIMULAÇÃO DE QUEIMA USANDO O CÓDIGO
WIMSD-5B CONSIDERANDO DIFERENTES BIBLIOTECAS DE DADOS
NUCLEARES**

DESIRÉE YAEL DE SENA TAVARES

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIA
E TECNOLOGIA NUCLEARES DO INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR DA
COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIA E
TECNOLOGIA NUCLEARES.

Aprovada por:

Prof. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc.

Prof. Rubens Souza dos Santos, D.Sc.

Prof. Julio Cezar Suita, D.Sc.

Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
JUNHO DE 2017

Ao meu filho Arthur Sena Leiras, com todo meu amor.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por me prover saúde e força durante toda esta caminhada.

A minha querida mãe, que me deu todo o suporte mesmo com suas limitações, sempre esteve ao meu lado. Foi onde busquei e encontrei compreensão, colo, amor, coragem e esperança.

Ao meu pai, que sempre foi muito solícito em me ajudar quando precisei, seu papel tornou-se fundamental em todas as minhas conquistas.

Agradeço ao meu orientador, Zelmo pelo apoio, confiança e por estar sempre disposto a me ajudar em todos os momentos de dificuldades.

Ao meu companheiro Anderson por toda e paciência e compreensão.

Aos meus colegas de classe, pelas inúmeras contribuições e troca de conhecimentos, além de proporcionarem momentos de descontração amenizando a difícil tarefa desta longa caminhada.

Agradeço a todos os funcionários do IEN, e ao Programa de Pós Graduação - PPGCTN por me acolherem durante o período do mestrado, inclusive durante o processo seletivo. Em especial à Servidora Cláudia Maria Dias Coelho, aos Professores César Marques Salgado, Luiz Eduardo Barreira Brandão, Julio Cesar Suita, Ana Cristina de Holanda Nascimento e à Cristina de Souza Pereira.

Aos membros da banca examinadora, Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves, Prof. Julio Cesar Suita e Prof. Rubens Souza dos Santos por gentilmente se disponibilizarem a participar.

À CNEN e ao IEN por me permitirem utilizar seu espaço e todas suas ferramentas científica, educacional e tecnológica, além de disponibilizar profissionais de alto cunho técnico para me auxiliar.

A CAPES por me conceder a bolsa de estudos.

“É muito melhor lançar-se em busca de conquistas grandiosas, mesmo expondo-se ao fracasso, do que alinhar-se com os pobres de espírito, que nem gozam muito, nem sofrem muito, porque vivem numa penumbra cinzenta, onde não conhecem nem vitória, nem derrota.”

(Theodore Roosenvelt)

RESUMO

Este trabalho propõe programar o cálculo de célula considerando a queima de combustível utilizando o código WIMSD-5B. O procedimento de cálculo de célula permite determinar os parâmetros nucleares presentes na equação de difusão de nêutrons multi-grupo e para este fim a teoria do transporte de nêutrons é utilizada em um problema com redução dimensional, mas, em contrapartida é considerado um grande número de grupos de energia associados ao espectro de nêutrons. Há uma variedade de códigos de física do reator que determinam os parâmetros nucleares resolvendo a equação de transporte de nêutrons aplicada em uma célula equivalente representando um elemento combustível. O código WIMSD-5B é um código determinístico e que resolve a equação de transporte utilizando método de probabilidade de colisão. A simulação de queima de combustível no cálculo de célula levou em conta diferentes bibliotecas de dados nucleares. O código WIMSD-5B suporta várias bibliotecas de dados nucleares e no presente trabalho foram utilizadas as seguintes bibliotecas: IAEA, ENDFB-VII.1, JENDL3.2, JEFF3.1 e JEF2.2, todas formatadas para 69 grupos de energia.

Palavras-chave: Reatores Nucleares, Cálculo de Células, WIMSD-5B, Queima, Bibliotecas de Dados Nucleares.

ABSTRACT

This work proposes to implement the cell calculation considering the fuel burning using the WIMSD-5B code. The cell calculation procedure allows determining the nuclear parameters present in the multi-group neutron diffusion equation and for this purpose the neutron transport theory is used in a problem with dimensional reduction, but in contrast is considered a large number of groups associated with the neutron spectrum. There are a variety of reactor physics codes that determine the nuclear parameters by solving the neutron transport equation applied to an equivalent cell representing a fuel element. The WIMSD-5B code is a deterministic code that solves the transport equation using collision probability method. The simulation of fuel burning in the cell calculation took into account different nuclear data libraries. The WIMSD-5B code supports several nuclear data libraries and in the present work the following libraries were used: IAEA, ENDFB-VII.1, JENDL3.2, JEFF3.1 and JEF2.2, all formatted for 69 energy groups.

Keywords: Cell Calculation, Neutron Transport, Burnup, WIMSD-5B, Nuclear Data Libraries.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1: DIAGRAMA GERAL DOS DADOS DE ENTRADA E DE SAÍDA DE UM TÍPICO CÓDIGO DE CÁLCULO DE CÉLULA	20
FIGURA 2: TÍPICOS ELEMENTOS COMBUSTÍVEIS. (A) PWR; (B) BWR; (C) HTRG; (D) MRT. (ADAPTADO DE DUDERSSTAD, 1976).	24
FIGURA 3: ESTRUTURAS TÍPICAS DE REDES EM ELEMENTOS COMBUSTÍVEIS	25
FIGURA 4: HOMOGENEIZAÇÃO DE CÉLULA COMBUSTÍVEL	26
FIGURA 5: HOMOGENEIZAÇÃO DE ELEMENTO COMBUSTÍVEL	26
FIGURA 6: CÉLULA DE COMBUSTÍVEL UNITÁRIA COM DUAS REGIÕES	27
FIGURA 7: (OKUMURA ET AL. 2000, 2007; CACUCI (2010))	36
FIGURA 8: CADEIA DE QUEIMA DO CÓDIGO MVP-BURN PARA NUCLÍDEOS PRODUTOS DE FISSÃO (CADEIA DE QUEIMA PADRÃO) (OKUMURA ET AL. 2000, 2007; CACUCI (2010)).	36
FIGURA 9: CADEIAS DESENVOLVIDAS INCLUINDO ^{105}Rh E O ^{105}Pd DO CÓDIGO MVP-BURN (OKUMURA ET AL. 2000, 2007; CACUCI (2010)).	37
FIGURA 10: CADEIA DE QUEIMA DO CÓDIGO MVP-BURN PARA NUCLÍDEOS VENENOS QUEIMÁVEIS (CADEIA DE QUEIMA PADRÃO) (OKUMURA ET AL. 2000, 2007; CACUCI (2010)).	37
FIGURA 11: (A) CÉLULA GEOMÉTRICA, DESTAQUE EM LARANJA, DE UM ELEMENTO COMBUSTÍVEL TIPO PLACA; (B) CÉLULA EQUIVALENTE, REPRESENTATIVA DA CÉLULA GEOMÉTRICA: A= MIOL, B= REVESTIMENTO, C= ÁGUA, D= EXCESSO DE ÁGUA + ALUMÍNIO.....	42
FIGURA 12: PRINCIPAIS ETAPAS DO CÓDIGO WIMSD-5B	55
FIGURA 13: TRANSIÇÕES DE DECAIMENTO E QUEIMA DE ACTINÍDEOS IMPLEMENTADAS NA BIBLIOTECA WIMSD-IAEA.....	56
FIGURA 14: CADEIA DE PRODUTO DE FISSÃO IMPLEMENTADAS NA BIBLIOTECA WIMSD-IAEA.	57
FIGURA 15: MTR-IAEA.....	59
FIGURA 16: VISTA LATERAL DO MTR-IAEA	59
FIGURA 17: SESSÃO TRANSVERSAL DO ELEMENTO COMBUSTÍVEL DO REATOR DE PESQUISA MTR-IAEA (UNIDADES EM CM).....	60
FIGURA 18: MACROMOLÉCULA M DO EC DO MTR-IAEA.....	61

FIGURA 19: CÉLULA EQUIVALENTE M _E	62
FIGURA 20: CÉLULA EQUIVALENTE DEFINITIVA M _E (ESPESSURA SEM ESCALA).....	63
FIGURA 21: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO U-234 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	67
FIGURA 22: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO U-235 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	67
FIGURA 23: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO U-236 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	68
FIGURA 24: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO U-237 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	68
FIGURA 25: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO U-238 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	69
FIGURA 26: VARIAÇÃO DA DENSIDADE ATÔMICA DO Np-237 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	69
FIGURA 27: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Np-239 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	70
FIGURA 28: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pu-238 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	70
FIGURA 29: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pu-239 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	71
FIGURA 30: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pu-240 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	71
FIGURA 31: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pu-241 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	72
FIGURA 32: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pu-242 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	72
FIGURA 33: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Am-241 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	73
FIGURA 34: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Am-242M EM FUNÇÃO DA QUEIMA	73
FIGURA 35: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Am-243 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	74
FIGURA 36: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Cm-242 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	74
FIGURA 37: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Cm-243 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	75
FIGURA 38: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Cm-244 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	75
FIGURA 39: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO FP-4902 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	76
FIGURA 40: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO U-237 (PPF) EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	76
FIGURA 41: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Am-242 (1952) EM FUNÇÃO DA QUEIMA..	77
FIGURA 42: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Gd-154 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	77
FIGURA 43: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Gd-155 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	78
FIGURA 44: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Gd-156 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	78
FIGURA 45: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Gd-157 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	79
FIGURA 46: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Gd-158 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	79
FIGURA 47: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Dy-160 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	80
FIGURA 48: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Dy-161 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	80
FIGURA 49: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Dy-162 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	81
FIGURA 50: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Dy-163 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	81
FIGURA 51: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Dy-164 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	82

FIGURA 52: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Ho-165 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	82
FIGURA 53: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO ER-166 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	83
FIGURA 54: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO ER-167 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	83
FIGURA 55: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO KR-83 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	84
FIGURA 56: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Mo-95 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	84
FIGURA 57: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Tc-99 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	85
FIGURA 58: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Ru-101 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	85
FIGURA 59: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Ru-103 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	86
FIGURA 60: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Ru-106 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	86
FIGURA 61: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Rh-103 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	87
FIGURA 62: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Rh-105 EM FUNÇÃO A QUEIMA	87
FIGURA 63: VARIAÇÃO DE DENSIDADE DO Pd-105 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	88
FIGURA 64: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pd-107 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	88
FIGURA 65: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pd-108 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	89
FIGURA 66: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Ag-109 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	89
FIGURA 67: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA EM FUNÇÃO DA QUEIMA	90
FIGURA 68: VARIAÇÃO DE DENSIDADE DO In-155 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	90
FIGURA 69: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Sb-125 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	91
FIGURA 70: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Te-127M EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	91
FIGURA 71: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO I-127 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	92
FIGURA 72: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Xe-131 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	92
FIGURA 73: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Cs-133 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	93
FIGURA 74: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Cs-134 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	93
FIGURA 75: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Cs-137 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	94
FIGURA 76: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO I-135 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	94
FIGURA 77: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Xe-134 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	95
FIGURA 78: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Xe-135 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	95
FIGURA 79: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Cs-135 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	96
FIGURA 80: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Xe-136 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	96
FIGURA 81: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Nd-143 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	97
FIGURA 82: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Nd-145 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	97
FIGURA 83: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO Pm-147 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	98
FIGURA 84: VARIAÇÃO DE DENSIDADE DO Pm-147 (5147) EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	98

FIGURA 85: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO SM-147 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	99
FIGURA 86: VARIAÇÃO DE DENSIDADE DO PM-148M EM FUNÇÃO DA QUEIMA	99
FIGURA 87: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO PU-148 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	100
FIGURA 88: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO SM-148 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	100
FIGURA 89: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO PU-149 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	101
FIGURA 90: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO SM-149 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	101
FIGURA 91: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO SM-150 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	102
FIGURA 92: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO SM-151 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	102
FIGURA 93: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO SM-152 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	103
FIGURA 94: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO EU-151 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	103
FIGURA 95: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO EU-152 EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	104
FIGURA 96: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO EU-153 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	104
FIGURA 97: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO EU-154 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	105
FIGURA 98: VARIAÇÃO DE DENSIDADE ATÔMICA DO EU-155 EM FUNÇÃO DA QUEIMA	105
FIGURA 99: VARIAÇÃO DE K_{∞} EM FUNÇÃO DA QUEIMA - COMPARAÇÃO COM O CÓDIGO EPRI-CELL	106
FIGURA 100: VARIAÇÃO DE K_{∞} EM FUNÇÃO DA QUEIMA	106
FIGURA 101: VARIAÇÃO DE COEFICIENTE DE DIFUSÃO RÁPIDO EM FUNÇÃO DA QUEIMA	107
FIGURA 102: VARIAÇÃO DA SESSÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO RÁPIDA EM FUNÇÃO DA QUEIMA	107
FIGURA 103: VARIAÇÃO DA SESSÃO DE CHOQUE DE REMOÇÃO RÁPIDA EM FUNÇÃO DA QUEIMA	108
FIGURA 104: VARIAÇÃO DA SESSÃO DE CHOQUE DE FISSÃO RÁPIDA EM FUNÇÃO DA QUEIMA ..	108
FIGURA 105: VARIAÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO TÉRMICO EM FUNÇÃO DA QUEIMA.....	109
FIGURA 106: VARIAÇÃO DA SESSÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO TÉRMICA EM FUNÇÃO DA QUEIMA	109
FIGURA 107: VARIAÇÃO DA SESSÃO DE CHOQUE DE REMOÇÃO TÉRMICA EM FUNÇÃO DA QUEIMA	110
FIGURA 108: VARIAÇÃO DA SESSÃO DE CHOQUE DE FISSÃO TÉRMICA EM FUNÇÃO DA QUEIMA	110

LISTA DE TABELAS

TABELA 1: CONTEÚDO DA BIBLIOTECA ENDF/B-VII.1 COMPARADO COM AS BIBLIOTECAS ENDF/B-VII.0 E ENDF/B-VI.8.....	47
TABELA 2: ESTRUTURA COM 69 GRUPOS DE ENERGIA UTILIZADA PELO CÓDIGO WIMSD-5B	54
TABELA 3: DIMENSÕES E CARACTERÍSTICAS DO ELEMENTO COMBUSTÍVEL DO REATOR DE PESQUISA - MTR-IAEA.....	61
TABELA 4: DENSIDADES ATÔMICAS E ESPESSURAS DA CÉLULA EQUIVALENTE DE ELEMENTO COMBUSTÍVEL DO MTR-IAEA COMPARADAS COM OS DADOS DE REFERÊNCIA	64
TABELA 5: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS IAEA E ENDF B-VII.1.....	111
TABELA 6: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS IAEA E JENDL3.2.....	111
TABELA 7: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS IAEA E JEF 2.2.	111
TABELA 8: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS IAEA E JEFF 3.1.....	112
TABELA 9: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS ENDF B-VII.1 E JENDL 3.2.....	112
TABELA 10: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS ENDF B-VII.1 E JEF 2.2.	112
TABELA 11: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS ENDF B-VII.1 E JEFF 3.1.....	113
TABELA 12: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS JENDL 3.2 E JEF 2.2.	113
TABELA 13: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS JENDL 3.2 E JEFF 3.1.....	113
TABELA 14: DESVIO RELATIVO ABSOLUTO PERCENTUAL ENTRE AS BIBLIOTECAS JEF 2.2 E JEFF 3.1.....	114

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

IAEA	-	Agencia Internacional de Energia Atômica
WIMS	-	Winfirth Improved Multigroup Scheme
LANL	-	Laboratório Nacional Los Alamos
LLNL	-	Laboratório Nacional Lawrence Livermore
BNL	-	Laboratório Nacional de Brookhaven
NEA	-	Agência de Energia Nuclear
ORNL	-	Laboratório Nacional Oak Ridge
INDC	-	Contribuição Prevista Nacionalmente Determinada
ICTP	-	International Centre for Theoretical Physics
WLUP	-	WIMS Library Update Project
EC	-	Elemento Combustível

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1	18
1. INTRODUÇÃO	18
1.1. CONTEXTUALIZAÇÃO	18
1.2. OBJETIVO	21
CAPÍTULO 2	22
2. FUNDAMENTOS	22
2.1. INTRODUÇÃO	22
2.2. HOMOGENEIZAÇÃO DA CÉLULA E DO ELEMENTO	23
2.2.1. Técnicas de Cálculo de Célula	26
2.2.2. Colapsação de Grupos	30
2.3. CÁLCULOS DE QUEIMA	31
2.3.1. Fenômenos que Ocorrem Durante a Queima	32
2.3.2. Cadeias de Queima	34
2.3.3. Equação de Queima na Formulação Geral	38
2.3.4. Unidades de Queima	39
CAPÍTULO 3	41
3. METODOLOGIA	41
3.1. CÉLULA EQUIVALENTE PARA COMBUSTÍVEL TIPO PLACA	41
3.2. AS BIBLIOTECAS DE DADOS NUCLEARES AVALIADOS	43
3.2.1. O Formato ENDF-6	44
3.2.2. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados ENDF/B	45
3.2.3. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados JEFF-3.1	48
3.2.4. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados JEF-2.2	49
3.2.5. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados JENDL-3.3 e JENDL-3.2	49
3.2.6. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados IAEA	50
3.3. O CÓDIGO WIMSD-5B	52
CAPÍTULO 4	58
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES	58
4.1. Determinação da Célula Equivalente do MTR-IAEA	58
4.1.1. Cálculo das áreas da Macrocelula M	62

4.1.2. Célula equivalente da macromolécula (M) – Me	62
4.1.3. Célula equivalente definitiva M	63
4.2. <i>Bibliotecas de Dados Nucleares Avaliados Utilizadas</i>	64
4.3. <i>Simulação da Queima e Análises</i>	64
CAPÍTULO 5	115
5. CONCLUSÃO.....	115
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	116
APÊNDICE I.....	118
APÊNDICE II	121
APÊNDICE III.....	123

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

1.1. CONTEXTUALIZAÇÃO

Em um reator nuclear em operação, a composição do material de um combustível nuclear muda constantemente. Na fissão nuclear, o núcleo original se divide em nuclídeos mais leves, liberando partículas secundárias e energia. Além disso, os nuclídeos se transformam em outros nuclídeos através de diversas reações de transmutação induzidas por nêutrons e de decaimento radioativo espontâneo. O processo de decaimento radioativo continua mesmo quando o combustível nuclear é removido do reator (PUSA, 2013).

Em muitas aplicações, é essencial ser capaz de prever as mudanças na composição do combustível nuclear. Por exemplo, a segurança e a economia da carga de combustível do núcleo de um reator dependem fortemente das mudanças nas concentrações de nuclídeos e de como essas mudanças são compensadas. Isto é relevante na concepção de novos conceitos de reatores e na otimização da carga de combustível do núcleo dos reatores existentes. Além disso, é importante avaliar a decomposição material do combustível irradiado após a sua remoção do reator e em qualquer momento posterior. As aplicações de deposição final requerem a previsão das concentrações de nuclídeos em passos de tempo da ordem de milhares de anos.

Na prática, as alterações na composição do material do combustível nuclear são avaliadas por específicos códigos de cálculo de queima. Infelizmente, é extremamente difícil simular o problema na forma verdadeiramente dependente do tempo, devido ao acoplamento entre as concentrações de nuclídeos e a distribuição da densidade de nêutrons - as taxas de transmutação das reações induzidas por nêutrons dependem da distribuição da densidade de nêutrons no sistema e do nêutron. A distribuição da densidade de nêutrons, por outro lado, é fortemente dependente das composições isotópicas do material físsil.

Os cálculos de queima baseiam-se na suposição de que as concentrações de nuclídeos podem ser assumidas constantes quando se resolve a distribuição de densidade de nêutrons. Eles são formulados em torno de duas equações centrais na física de reatores, que são a equação de transporte de nêutrons e as equações de queima. A equação de transporte de nêutrons é essencialmente uma equação de equilíbrio para a densidade de nêutrons (DUDERSSTAD, 1976, STACEY, 2007).

Em cálculo de queima, é modelada como um problema de autovalor independente do tempo, chamado de equação de criticalidade, caso em que a solução compreende a distribuição de densidade de nêutrons e o fator de multiplicação, que caracteriza a dependência temporal do sistema. Com base na solução de distribuição de densidade de nêutrons, é possível calcular as taxas nas quais os nuclídeos se transformam em outros nuclídeos.

Essas taxas de reação podem ser utilizadas para formar as equações de queima, que regem as alterações nas concentrações de nuclídeos ao longo do tempo. Os cálculos de queima formam um processo cíclico, onde o sistema é modelado durante a evolução do tempo, resolvendo a equação de criticalidade (equação de transporte de nêutrons ou de difusão de nêutrons) e as equações de queima de uma maneira sequencial.

Em uma primeira análise de um núcleo de reator existem configurações computacionais que consideram o núcleo com dimensão infinita, explorando a geometria repetitiva, e um elevado número de grupos de energia. Essas configurações computacionais são chamadas de códigos de cálculo de célula ou de rede. Esses códigos são utilizados para determinar a distribuição do fluxo de nêutrons e o fator de multiplicação em um meio infinito. Para isso é necessário fornecer com dados de entrada desses códigos as bibliotecas multi-grupo de dados nucleares dos isótopos e também a descrição da célula que se repete infinitamente no reator, também conhecida como célula equivalente.

Os códigos de cálculo de célula resolvem a equação de transporte de nêutrons sobre uma região específica do reator. Essa região pode ser uma célula unitária ou uma macro-célula (KULIKOWSKA, 2000). Portanto, os códigos de cálculo de célula incluem métodos para resolver um apropriado conjunto de equações para o fluxo de nêutrons e fator de

multiplicação infinito, k_{∞} , considerando a energia discretizada e uma malha espacial (grupos de energia e pontos espaciais discretizados). O fluxo de nêutrons calculado pode ser utilizado para se obter conjuntos de seções de choque macroscópicas homogeneizadas cobrindo sub-regiões escolhidas e em uma larga estrutura de grupos de energia. Esses conjuntos de seções de choque macroscópicas são então utilizados como dados materiais na entrada para diversos códigos que resolvem a equação de transporte de nêutrons ou a equação de difusão de nêutrons, sobre o núcleo inteiro do reator ou parte dele. O fluxo de nêutrons calculado assim pode ser então utilizado para o cálculo das taxas de reações ou em cálculos da depleção do combustível distribuídas sobre esse efetivo núcleo.

Outra funcionalidade importante que é encontrada na maioria dos códigos de cálculo de célula é a capacidade de simular a queima durante a operação do reator nuclear, fornecendo as concentrações dos diversos nuclídeos, bem como, os conjuntos de seções de choque macroscópicas em cada passo de queima.

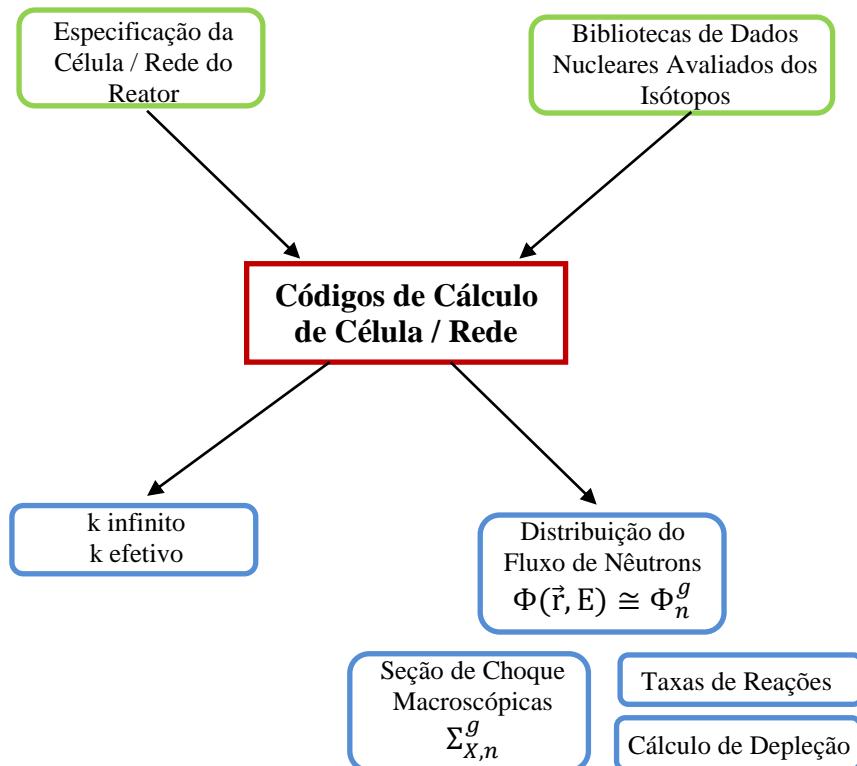


Figura 1: Diagrama geral dos dados de entrada e de saída de um típico código de cálculo de célula

1.2. OBJETIVO

O presente trabalho tem por objetivo simular a queima usando o código de cálculo de célula WIMSD-5B (*Winfrith Improved Multi-group Scheme*) (ASKEW, 1966, BARCLAY, 1966, ROTH, 1967, KEMSELL, 1980, IAEA, 2007), considerando cinco bibliotecas de dados nucleares formatadas e atualizadas pela IAEA e um típico reator de pesquisa com elementos combustíveis tipo placa. Como resultados de simulação são apresentadas as concentrações dos diversos nuclídeos e as seções de choque macroscópicas associadas ao elemento combustível.

O capítulo 2 aborda a fundamentação teórica do cálculo de célula e homogeneização e descreve o código de cálculo de célula WIMSD-5B, apresentando as principais características do código.

O capítulo 3 destina-se a esboçar como é realizada a representação do reator por meio da célula equivalente, que contém informações importantes às quais são umas das partes dos dados de entrada para o código WIMSD-5B.

O capítulo 4 descreve as principais bibliotecas de dados nucleares disponíveis atualmente para o código WIMSD-5B.

O capítulo 5 apresenta os resultados obtidos, as simulações e as observações realizadas para o caso estudado.

O capítulo 6 apresenta as conclusões e sugestões para trabalhos que possam ser desenvolvidos futuramente.

CAPÍTULO 2

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. INTRODUÇÃO

Um reator nuclear é um dispositivo muito complexo em termos de geometria, composição e dados nucleares envolvidos, que uma abordagem totalmente numérica provavelmente ainda está longe de ser concretizada. Podemos imaginar um cálculo de um núcleo de reator de água pressurizada sem modelagem. O núcleo contém aproximadamente 200 elementos mais o refletor. Cada elemento compreende 290 células em média. Cada célula tem pelo menos dez zonas radiais e cerca de cinquenta zonas axiais. Para identificar os eixos ao longo dos quais os nêutrons viajam, é necessária uma centena de direções angulares. A estrutura muito complicada das curvas das seções de choque requer uma discretização em energia de pelo menos 20.000 pontos. Um cálculo de evolução (isto é, a mudança normal ao longo de alguns meses ou ano, com queima, por exemplo, ou uma pequena sequência acidental, eventos transientes), levando em conta as reações contrárias, envolve pelo menos cinquenta cálculos. Se todas essas considerações juntas forem multiplicadas, será necessário determinar aproximadamente 3×10^{15} valores de fluxo de nêutrons. É muito provável que essa quantidade de cálculos vai além da capacidade das máquinas computacionais mesmo as mais poderosas (REUSS, 2008).

Isso demonstra como a modelagem é essencial se for desejável realizar cálculos de física de reatores na prática. O talento de um físico de reatores reside na capacidade de escolher o melhor modelo para atingir dois objetivos aparentemente antagônicos: obter resultados muito precisos e mantendo o volume de cálculos numéricos até um nível “razoável”. As escolhas feitas constituirão o “esquema de cálculo” do físico de reatores (REUSS, 2008).

Antes de realizar qualquer cálculo de física de reatores, é necessário reunir os dados nucleares necessários. O esquema de cálculo baseia-se na simples observação de que existem

três níveis distintos de detalhe na física de reatores de um reator nuclear:

- Nível macroscópico: um núcleo possui uma estrutura heterogênea devido às diferenças entre os elementos colocadas nele;
- Nível intermediário: considera uma estrutura heterogênea dentro de cada elemento: Combustível, revestimento, moderador, etc.;
- Nível em escala mais fina: observam-se fenômenos complexos de auto blindagem devido à presença de muitas ressonâncias de núcleos pesados.

Esses problemas devem ser abordados na ordem inversa; Lidar com os detalhes finos primeiro e, em seguida, realizar a média essencial antes de processar o próximo nível. A relevância do esquema de cálculo será relacionada à escolha cuidadosa dos limites entre esses níveis e as fórmulas médias a serem introduzidas. Sua qualidade também dependerá da precisão dos modelos e dos cálculos numéricos utilizados em cada estágio. Quando se considera a queima do combustível, esses cálculos são repetidos em cada passo de queima que são previamente especificados (REUSS, 2008).

Para este trabalho os níveis intermediários e em escala mais fina são os mais relevantes.

2.2. HOMOGENEIZAÇÃO DA CÉLULA E DO ELEMENTO

Inicialmente podemos notar que os núcleos dos reatores têm uma estrutura de rede periódica ou periódica, na qual um sub elemento ou a chamada célula unitária é repetida pelo núcleo. Por exemplo, um subconjunto de combustível ou grupo de subconjuntos de combustíveis, como aqueles esboçados na Figura 2, pode ser considerado uma célula unitária. Para um núcleo de um PWR, e em uma escala mais detalhada, uma determinada vareta de combustível e o canal refrigerante adjacente podem ser escolhidos como a célula unitária (Figura 3). No caso de um núcleo de um reator de pesquisa com elementos tipo placa, uma placa com os canais refrigerantes adjacentes podem ser a célula unitária em um nível mais detalhado (DUDERSSTAD, 1976). Para tipos de reatores que usam partículas combustíveis revestidas, é frequentemente necessário considerar uma microesfera de combustível ou “grão” como sendo uma célula unitária. No entanto, está claro que a estrutura da rede do reator não é

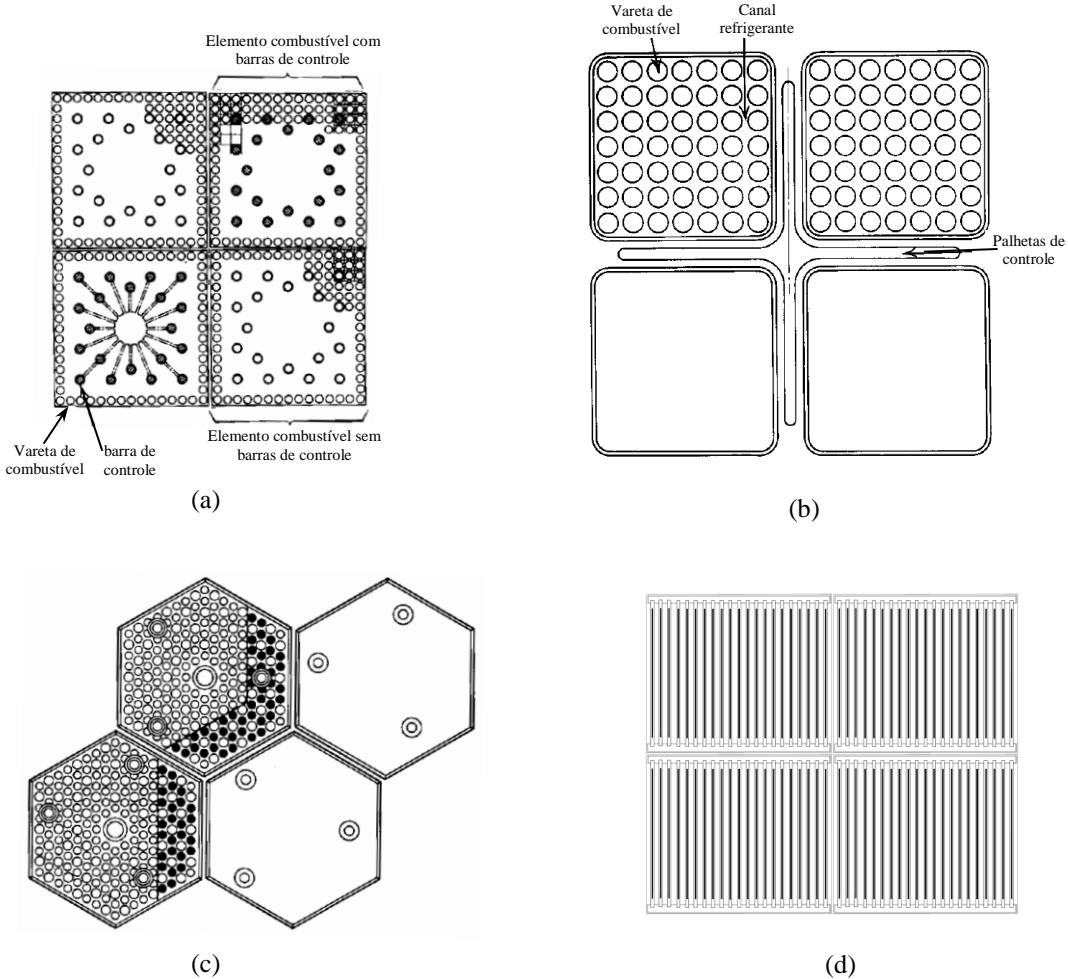


Figura 2: Típicos elementos combustíveis. (a) PWR; (b) BWR; (c) HTRG; (d) MRT.
(Adaptado de DUDERSSTAD, 1976).

precisamente regular por causa de dispositivos de controle ou instrumentação, cargas de combustíveis não uniformes e densidades de refrigerante, limites de núcleo e assim por diante. Essas irregularidades de rede são normalmente tratadas no cálculo global de difusão multigrupo da distribuição de fluxo de nêutrons no núcleo. Para os propósitos dessa análise, ignoraremos essas irregularidades grosseiras e assumiremos que o núcleo pode ser representado como uma matriz infinita de células de rede idênticas (DUDERSSTAD, 1976). O esquema essencial é, então, realizar um cálculo detalhado da distribuição do fluxo de nêutrons em uma determinada célula unitária da rede - geralmente assumindo que existe uma corrente de nêutrons nula no limite da célula (usando argumentos baseados na simetria da rede). As várias seções de choque multigrupo que caracterizam os materiais na célula são então calculadas espacialmente sobre a célula, usando a distribuição do fluxo de nêutrons como uma função de ponderação. Desta forma, pode-se caracterizar a célula por constantes de grupo efetivas que representam a distribuição de fluxo não homogêneo na célula. Este

esquema substitui essencialmente a célula unitária real por uma célula unitária homogênea equivalente, caracterizada por estas seções de choque efetivas. Por exemplo, geralmente começa-se considerando uma célula de combustível típica, ou seja, combustível revestido mais refrigerante.

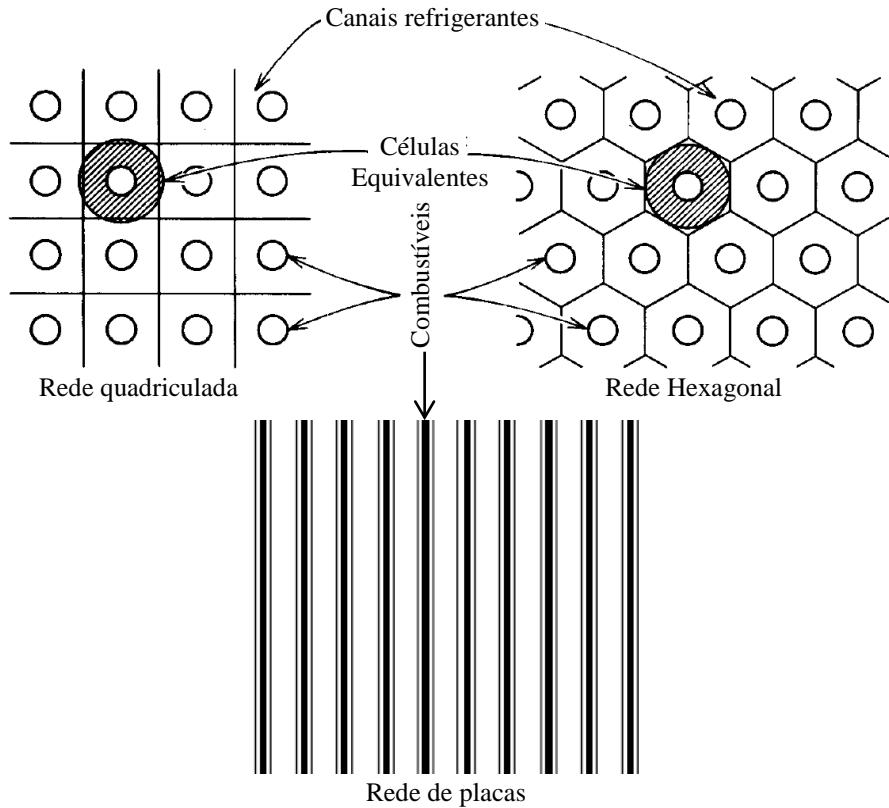


Figura 3: Estruturas típicas de redes em elementos combustíveis

A célula de combustível é primeiro, reduzida a uma célula equivalente de geometria mais simples para acelerar os cálculos (ver a Figura 4), tendo o cuidado de preservar as frações de volume. O principal interesse reside na geração de constantes efetivas (parâmetros nucleares) de grupo rápido e térmico para essa célula. Na faixa rápida, as heterogeneidades estão principalmente nas variações na probabilidade de escape de ressonância e seções de choque de fissão rápidas. O livre caminho médio muito mais curto que caracteriza os nêutrons térmicos requer um tratamento um pouco mais detalhado das heterogeneidades na determinação do espectro de fluxo térmico em uma célula de combustível (DUDERSSTAD, 1976). Para cálculos de núcleo menos detalhados, pode-se simplesmente modificar os resultados de um cálculo espectral em um meio infinito para explicar as variações no fluxo médio no combustível, $\bar{\phi}_F$, no moderador, $\bar{\phi}_M$ e no revestimento, $\bar{\phi}_C$. Uma quantidade

importante nos cálculos são os chamados fatores de desvantagem térmica, $\bar{\phi}_M/\bar{\phi}_F$ e $\bar{\phi}_C/\bar{\phi}_F$, que entram nas modificações dos resultados do cálculo espectral médio infinito. Cálculos mais detalhados de espectros térmicos geralmente envolvem uma solução direta da equação de transporte de nêutrons que caracteriza a célula. Esses cálculos de célula de combustível são normalmente realizados sob o pressuposto de fuga líquida de nêutrons é zero entre as células (que desacopla as células de combustível uma da outra) (DUDERSSTAD, 1976).

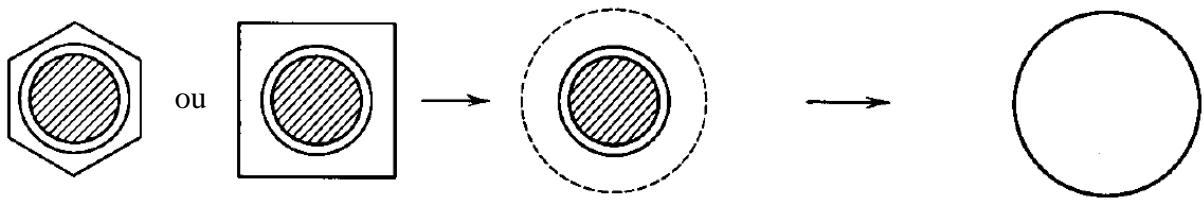


Figura 4: Homogeneização de célula combustível

O próximo passo na análise do núcleo é considerar um elemento típico de combustível ou agrupamento de elementos combustíveis, incluindo elementos de controle ou de compensação (Figura 5). As constantes de poucos grupos calculadas para a célula de combustível podem ser usadas para descrever a maior parte do elemento, com exceção do material de controle que requer técnicas bastante especializadas. Geralmente, um código de difusão ou transporte multidimensional multi-grupo detalhado é usado para determinar o fluxo de nêutrons desse elemento e, mais uma vez, esses fluxos são usados para gerar constantes médias de grupo do elemento. O passo final é usar essas constantes médias de grupo do elemento (ou, em cálculos muito detalhados, pino-a-pino, as constantes de grupo das células de combustível originais) para determinar a distribuição de fluxo e potência em todo o núcleo do reator (DUDERSSTAD, 1976).

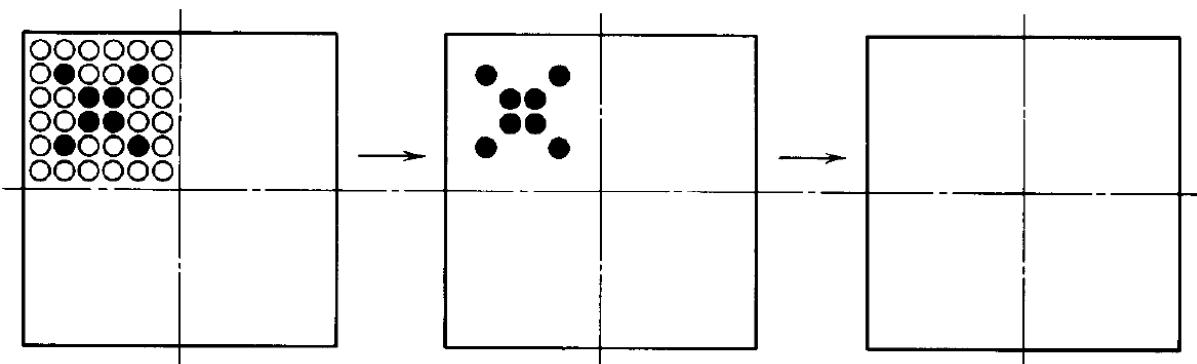


Figura 5: Homogeneização de elemento combustível

O objetivo desta seção é calcular as constantes de grupo efetivas que são médias espaciais sobre a distribuição de fluxo em uma célula de rede e, portanto, podem ser usadas para caracterizar a célula em cálculos de difusão multi-grupo subsequentes em que a estrutura celular é ignorada (cálculo global). Para discutir este assunto da média celular em maior detalhe, consideremos o cálculo da constante de grupo em média celular, caracterizando uma célula de duas regiões em que a composição do material é uniforme em cada região. Essas duas regiões são denotadas por “M” e “F” (Figura 6) (DUDERSSTAD, 1976).

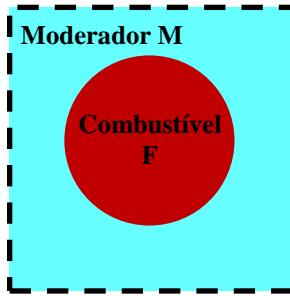


Figura 6: Célula de combustível unitária com duas regiões

A constante de grupo de célula média que caracteriza uma seção de choque geral seria então definida pela Equação 1:

$$\langle \Sigma_g \rangle_{cél.} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{V_{cél.}} \Sigma(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) d^3 r dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{V_{cél.}} \phi(\vec{r}, E) d^3 r dE}. \quad (1)$$

Essas constantes de grupo com base em células são frequentemente referidas como constantes de grupo auto-blindadas ou simplesmente blindadas, uma vez que a média sobre a distribuição do fluxo espacial na célula explica a depressão do fluxo causada pela auto blindagem. Podemos usar o fato de que a seção de choque $\Sigma(\vec{r}, E)$ é constante em cada região para reescrever Eq. 1 como

$$\langle \Sigma_g \rangle_{cél.} = \frac{V_M \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma^M(E) \bar{\phi}_M(E) dE + V_F \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma^F(E) \bar{\phi}_F(E) dE}{V_M \int_{E_g}^{E_{g-1}} \bar{\phi}_M(E) dE + V_F \int_{E_g}^{E_{g-1}} \bar{\phi}_F(E) dE}, \quad (2)$$

onde foram definidos os fluxos intragrupo na célula média, no moderador e no combustível como, respectivamente:

$$\bar{\phi}_M(E) \equiv \frac{1}{V_M} \int_{V_M} \phi(\vec{r}, E) d^3r \quad e \quad \bar{\phi}_F(E) \equiv \frac{1}{V_F} \int_{V_F} \phi(\vec{r}, E) d^3r \quad . \quad (3)$$

Agora, se de fato o fluxo de nêutrons na célula fosse separável no espaço e na energia, tal que

$$\phi(\vec{r}, E) = \phi(\vec{r})\psi(E) \quad (4)$$

ou seja, se ambas as regiões da célula se caracterizassem pelo mesmo espectro intragrupo, então pode-se colapsar a Eq. 1 para

$$\langle \Sigma_g \rangle_{cél.} = \frac{V_M \Sigma_g^M \bar{\phi}_M + V_F \Sigma_g^F \bar{\phi}_F}{V_M \bar{\phi}_M + V_F \bar{\phi}_F} \quad (5)$$

ou

$$\langle \Sigma_g \rangle_{cél.} = \frac{\Sigma_g^F + \zeta(V_M/V_F)\Sigma_g^M}{1 + \zeta(V_M/V_F)} \quad (6)$$

onde as constantes de grupo por região são definidas como

$$\Sigma_g^F \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma^F(E) \psi(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(E) dE} \quad (7)$$

e

$$\Sigma_g^M \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma^M(E) \psi(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(E) dE}, \quad (8)$$

enquanto os fluxos médios espaciais são definidas como

$$\bar{\phi}_M \equiv \frac{1}{V_M} \int_{V_M} \phi(\vec{r}) d^3r \quad e \quad \bar{\phi}_F \equiv \frac{1}{V_F} \int_{V_F} \phi(\vec{r}) d^3r \quad , \quad (9)$$

e o fator de desvantagem na célula é definido como anteriormente,

$$\zeta = \frac{\bar{\phi}_M}{\bar{\phi}_F} \quad . \quad (10)$$

É claro que o fluxo de nêutrons em uma típica rede de células raramente é separável no espaço e na energia. No entanto, em muitos esquemas de homogeneização de células, essa separabilidade é assumida para separar a determinação do espectro de nêutrons $\psi(E)$ para ser usado como função de ponderação em média de energia a partir do cálculo do fator de desvantagem ζ para ser utilizado como parâmetro de ponderação na célula média espacial. Tais procedimentos começam pela homogeneização de combustível, revestimento, refrigerante, e assim por diante sobre o volume da célula de combustível e depois calculando o espectro de energia de nêutrons $\psi(E)$ para esta célula homogeneizada usando um código de espectro de meio infinito, como por exemplo, o código de cálculo de célula WIMSD-5B. Em seguida, esse espectro é usado para calcular as constantes de grupo de energia para cada região da célula, por exemplo, Σ_g^F e Σ_g^M (DUDERSSTAD, 1976). Um cálculo espacial auxiliar em uma velocidade do fator de desvantagem da célula, ζ , é realizado, geralmente em uma energia média que caracteriza o grupo de interesse e, finalmente, as constantes de grupo Σ_g^F e Σ_g^M são combinadas usando ζ para obter a constante de grupo da célula média $\langle \Sigma_g \rangle_{cél.}$.

Um cálculo detalhado dependente do espaço e do espectro na célula pode ser realizado e as constantes de grupo da célula podem ser diretamente obtidas da definição dada pela Eq. 1. Para este fim, o fluxo $\phi(\vec{r}, E)$ é obtido através da solução da equação de transporte de nêutrons. O método de Probabilidade de Colisão pode ser utilizado para resolver a equação de transporte em sua formulação integral que é dada por:

$$\phi(\vec{r}, E) = \int \frac{\exp[-\tau(E, \vec{r}' \rightarrow \vec{r})]}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} \times \left[\int \sigma(\vec{r}', E' \rightarrow E) \phi(\vec{r}', E') dE' + Q(\vec{r}', E) \right] dV' , \quad (11)$$

onde $\tau(E, \vec{r}' \rightarrow \vec{r})$ é o comprimento do caminho óptico de \vec{r}' para \vec{r} (ou seja, o número de livres caminhos médios, ou a integral de $\sigma(\vec{r}, E)$ ao longo do caminho de \vec{r}' para \vec{r}). A quantidade entre colchetes é a fonte na energia E e dV' o elemento de volume em torno de \vec{r}' devido ao espalhamento de outras energias e contribuições externas. O fator no numerador é a atenuação de enquanto viaja de \vec{r}' para \vec{r} . Na prática, a faixa de energia é dividida em vários grupos de energia dentro dos quais a seção de choque pode ser tomada como constante, e a geometria é dividida em uma série de sub-regiões nas quais o fluxo e a fonte pode ser considerada como constantes. O resultado é:

$$\phi_{g,i} = \frac{1}{V_i \sigma_{g,i}} \sum_j V_j P_{g,j \rightarrow i} \left[\sum_{g'} \sigma_{g' \rightarrow g,j} \phi_{g',j} + Q_{g,j} \right], \quad (12)$$

onde $P_{g,j \rightarrow i}$ é a probabilidade de que um nêutron nascido no grupo g e sub-região j sofrerá a próxima colisão na sub-região i . A matriz de probabilidade de colisão é escrita na seguinte forma

$$P_{g,j \rightarrow i} = \frac{\sigma_{g,i}}{V_j} \int_{V_i} \int_{V_j} \frac{\exp[-\tau(E_g, \vec{r}' \rightarrow \vec{r})]}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|^2} dV dV'. \quad (13)$$

Os métodos de probabilidade de colisão têm sido amplamente utilizados para os cálculos de física do núcleo. Para uma célula de pino, as regiões de combustível, revestimento e moderadores são subdivididas em várias partes, a fim de tratar melhor a auto blindagem espacial. O fluxo resultante pode então ser utilizado para homogeneizar a célula e colapsar para uma estrutura de grupo mais grossa. Em seguida, esses resultados podem então ser utilizados por métodos mais simples, como o modelo de difusão, para completar o cálculo em geometria do núcleo inteiro do reator.

2.2.2. Colapsação de Grupos

A homogeneização célula-por-célula fornece a distribuição de energia em uma estrutura muito fina. É possível construir uma distribuição em energia considerando grupos que representam intervalos de energias mais largos. A colapsação para grupos mais largos pode ser feita da seguinte maneira:

$$\Sigma_{X,g} \equiv \frac{\sum_{m \in g} \Sigma_{X,m} \phi_m(E)}{\sum_{m \in g} \phi_m(E)}, \quad (14)$$

onde X denota qualquer tipo de seção de choque (total, elástica, captura, fissão, etc.) e $\Sigma_{m \in g}$ indica um somatório sobre todos os m grupos ultrafinos tendo um intervalo de energia ΔE_m situado em um intervalo maior de energia ΔE_g .

2.3. CÁLCULOS DE QUEIMA

A fissão nuclear é um dos principais mecanismos na geração de energia a partir de combustíveis nucleares. A composição dos combustíveis varia durante a irradiação em um núcleo de um reator nuclear. No vocabulário da física de reatores, a mudança na composição do combustível devido à fissão nuclear, captura de nêutrons, decaimento radioativo e outras reações e fatores, é referida como “queima” (*burnup*). A queima de um combustível nuclear é diferente do conceito convencional de queima, que é baseado em reações químicas. Portanto, quando o urânio “queima” em um núcleo de um reator nuclear, não há emissão de CO_2 , uma vez que a queima de um combustível nuclear é baseada em reações nucleares. Enquanto que a energia é liberada por mudanças nos estados de ligação química de materiais na queima convencional, na queima nuclear, a energia é gerada pelas mudanças na ligação nuclear. Se a queima é vista como um “processo de geração de energia através de mudanças em um material”, então a fissão nuclear pode, naturalmente, ser considerada como um fenômeno de queima. Nesse sentido, o termo técnico queima parece bastante e cuidadosamente escolhido. As propriedades dos combustíveis nucleares dependem da composição do combustível. As características do núcleo do reator, portanto, sofrem alterações durante a queima. Na prática, a predição precisa da vida útil do núcleo e do comportamento do reator durante a queima é uma parte essencial da análise do núcleo do reator. De fato, a precisão da predição dos cálculos de queima é um fator crítico na sequência de análise do reator.

Na análise do núcleo do reator, existem dois níveis de cálculo de queima: uma associada à análise da célula de rede (cálculo de célula) e outra associada à análise global do núcleo do reator. Esta dissertação tem como foco a primeira análise, ou seja, cálculo de queima em cálculos de célula.

2.3.1. Fenômenos que Ocorrem Durante a Queima

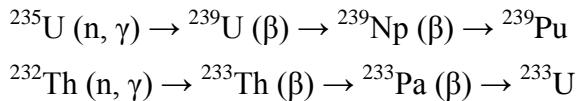
Durante a queima em um reator nuclear, ocorrem os seguintes fenômenos nos combustíveis nucleares:

a) Depleção de Nuclídeos Físseis

Os nuclídeos físseis, por exemplo, ^{233}U , ^{235}U , ^{239}Pu e ^{241}Pu são depletados durante a queima devido as reações de fissão. Este efeito tem um impacto negativo na reatividade do combustível, uma vez que o número de nuclídeos físseis diminui durante a queima.

b) Conversão de Nuclídeo Fértil em Nuclídeo Físsil

Os nuclídeos férteis tornam-se nuclídeos físseis através da reação de captura de nêutrons e pelo decaimento beta, por exemplo:



O efeito da conversão aumenta o número de nuclídeos físseis e, portanto, tem um impacto positivo na reatividade do combustível durante a queima.

c) Produção de Produtos de Fissão

As fissões de nuclídeos físseis produzem vários produtos de fissão. Uma vez que estes produtos de fissão são absorventes de nêutrons, eles têm um impacto negativo na reatividade do combustível.

Os três fenômenos acima mencionados ocorrem simultaneamente no combustível nuclear durante o processo de queima. Em reatores térmicos (por exemplo, reatores de água leve), o efeito de conversão é bastante pequeno, pois é observado que esse efeito ocorre por meio da captura ressonante no material fértil e na região epitérmica de energia. Enquanto que a absorção de nêutrons pelos produtos de fissão é muito intensa na região de energia térmica, devido ao espectro de nêutrons térmicos. Portanto, como os efeitos negativos sobre a reatividade, observados em a) e c), são grandes, e o efeito positivo, em b), é pequeno nos

reatores térmicos, o fator de multiplicação do combustível nuclear diminui à medida que o processo de queima transcorre.

Além dos efeitos citados acima, que têm um grande impacto na reatividade do combustível, os seguintes fenômenos também devem ser considerados como contribuintes para a reatividade do combustível:

d) Decaimento

Diversos nuclídeos são produzidos durante a queima, mas muitos deles são instáveis, de modo que são transformados em outros nuclídeos através da fissão, α , β , fissão espontânea e outros processos. O decaimento tem um impacto considerável na reatividade do combustível.

e) Transmutação de Nuclídeos devido à Absorção de Nêutrons

A conversão está incluída nesta categoria. Durante a queima, várias reações devido à absorção de nêutrons ocorrem da seguinte forma:

- ✓ **(n, 2n): absorção de nêutrons seguida de emissão de dois nêutrons;**
- ✓ **(n, 3n): absorção de nêutrons seguida de emissão de três nêutrons;**
- ✓ **(n, 4n): absorção de nêutrons seguida de emissão de quatro nêutrons;**
- ✓ **(n, γ): absorção de nêutrons seguida de emissão de radiação gama;**
- ✓ **(n, p): absorção de nêutrons seguida de emissão de um próton;**
- ✓ **(n, d): absorção de nêutrons seguida de emissão de um deutério;**
- ✓ **(n, t): absorção de nêutrons seguida de emissão de um trítio;**
- ✓ **(n, α): absorção de nêutrons seguida de emissão de uma partícula alfa;**
- ✓ **Outros processos.**

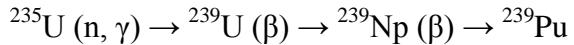
A transmutação de nuclídeos devido à absorção de nêutrons é muito importante, especialmente para cálculos de queima com veneno queimável em uma análise de reator de água leve. O veneno queimável é usado para ajustar as variações de reatividade durante a queima e melhorar as características neutrônicas do núcleo. Os nuclídeos absorventes

queimáveis carregados em um núcleo de reator no início do ciclo (BOC) são esgotados e convertidos em outros nuclídeos durante a queima através da captura de nêutrons. Assim, a reatividade negativa do veneno queimável diminui ou desaparece no final do ciclo (EOC).

O boro, o gadolínio e o érbio são os principais materiais absorventes queimáveis que são utilizados em projetos de reatores de água leve. O projeto e a implementação reais desses venenos queimáveis em um elemento de combustível são um tópico chave no projeto de combustíveis.

2.3.2. Cadeias de Queima

Conforme descrito na seção anterior, ocorrem várias transmutações de nuclídeos no núcleo do reator durante a queima. Em uma análise de queima, uma série de mudanças de nuclídeos é tratada pelo conceito de “cadeia”, uma vez que as transmutações de nuclídeos ocorrem sucessivamente. Nos cálculos de física de reatores, esta cadeia é conhecida como a cadeia de queima. Por exemplo, a conversão de um nuclídeo fértil para um nuclídeo físsil,



é uma cadeia típica de queima que aparece em análise do núcleo do reator. Em geral, as cadeias de queima são classificadas em termos dos seguintes nuclídeos:

- A. Nuclídeos Pesados (U, Th, Pu, Am, Cm, Np, etc.);**
- B. Produtos de fissão (Xe, Sm, Pm, Cs, I, Cd, etc.);**
- C. Absorvente queimável ou nuclídeos de venenos queimáveis (B, Gd, Er, etc.).**

As transmutações de nuclídeos reais durante a queima de combustíveis nucleares são altamente complicadas, com vários de milhares de nuclídeos sendo produzidos e desaparecendo através de várias reações nucleares. Uma vez que a modelagem direta de um comportamento de nuclídeos tão complexo não é viável, a computação de física de reatores para o cálculo de rede de células trata de específicos nuclídeos que têm impacto significativo ou considerável nas características da neutrônica.

Do ponto de vista da precisão do cálculo a modelagem detalhada é desejável; Isto é, o tratamento do maior número possível de nuclídeos. No entanto, muitas bibliotecas de seção de choque para esses nuclídeos devem ser preparadas e suas seções de choque efetivas devem ser avaliadas em cálculos de ressonância para tratar os muitos nuclídeos. Uma vez que esse tratamento detalhado é bastante oneroso em termos de armazenamento de memória e tempo de computação, o número de nuclídeos usado em um cálculo de queima deve ser seletivamente limitado. No caso de um cálculo de queima em uma pequena configuração, por exemplo, geometria de um pino-célula ou um conjunto de combustível, pode ser usada uma cadeia de queima muito detalhada. Nos cálculos reais do núcleo do reator, no entanto, a escala da configuração de cálculo deve ser cuidadosamente avaliada.

Para reduzir a carga computacional, o número de nuclídeos explicitamente tratado (independentemente) nos cálculos de queima pode ser limitado aos principais nuclídeos que têm um impacto considerável nas características da neurônica. Aqueles que tenham menor impacto serão reunidos e tratados de forma aproximada como um ou vários grupos. Os produtos de fissão, em particular, são muitas vezes modelados como vários grupos de nuclídeos de produtos de pseudo-fissão que compreendem múltiplos produtos de fissão. A modelagem de produtos de pseudo-fissão depende da cadeia de queima, e há variações nessa, variando de um modelo muito simples de um grupo (que combina todos os produtos de fissão que não são tratados explicitamente), a um modelo mais complexo (que considera a dependência de nuclídeos físsveis, comportamentos da saturação e de não saturação do número de densidade durante a queima). Por exemplo, o código MVP-BURN [OKUMURA et al. 2000, 2007; CACUCI (2010)], que é um código de Monte Carlo de energia contínua com a capacidade de simular a queima, possui várias cadeias de queima, como mostrado nas Figuras 7, 8, 9 e 10.

No Capítulo 2 serão discutidas com mais detalhes as cadeias de fissão que fazem parte do código WIMSD-5B.

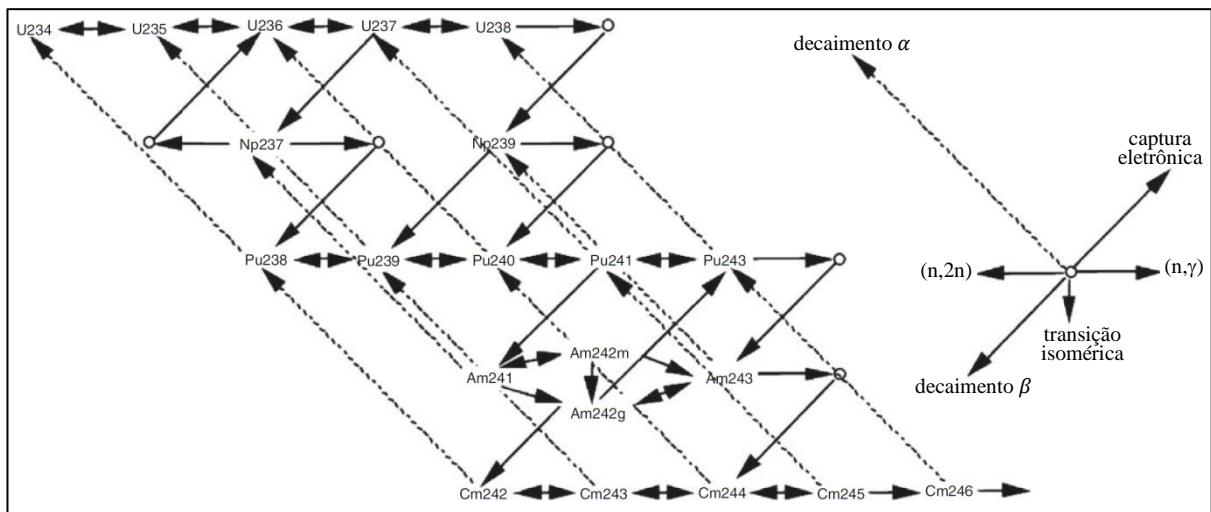


Figura 7: (OKUMURA et al. 2000, 2007; CACUCI (2010))

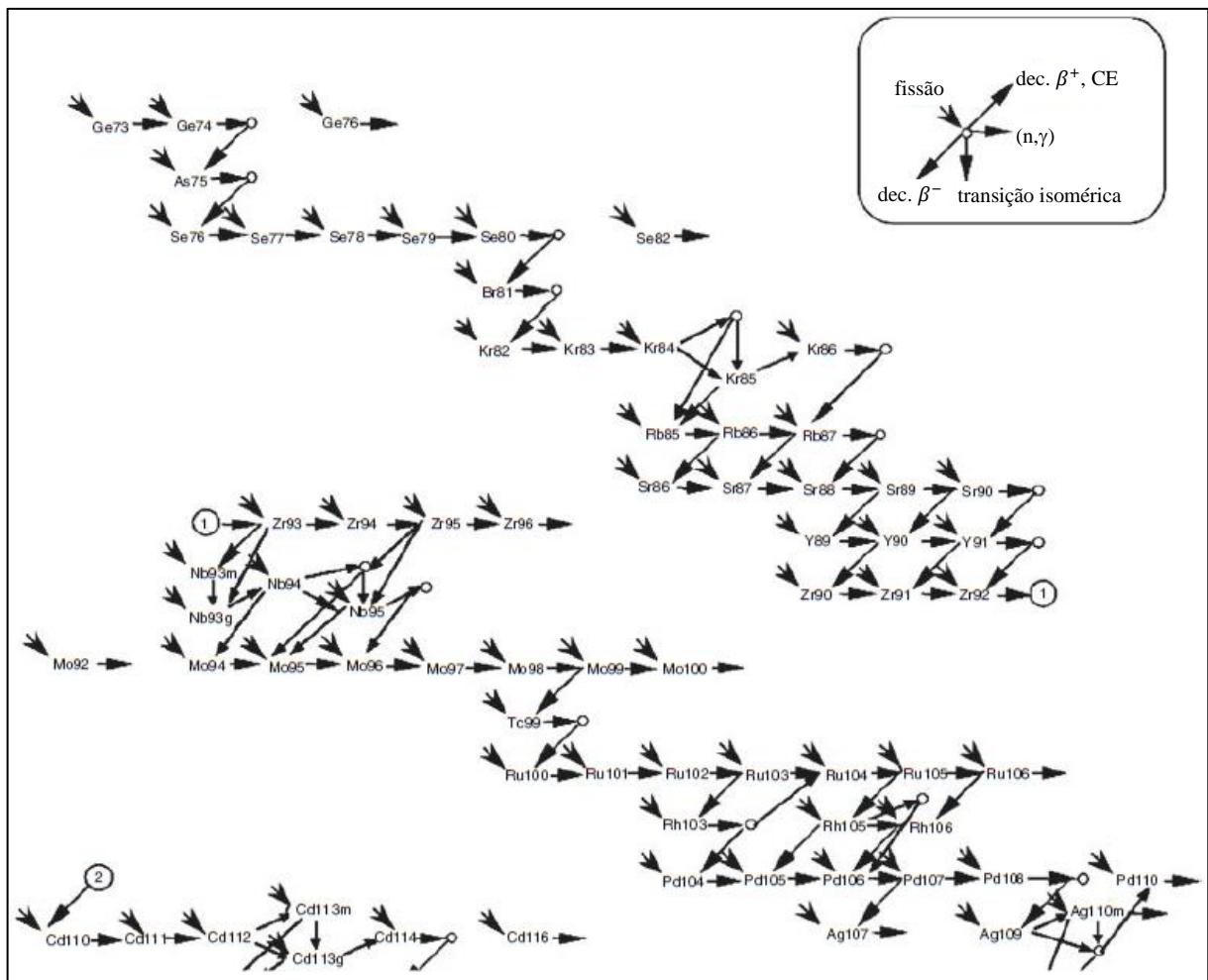


Figura 8: Cadeia de queima do código MVP-BURN para nuclídeos produtos de fissão (cadeia de queima padrão) (OKUMURA et al. 2000, 2007; CACUCI (2010)).

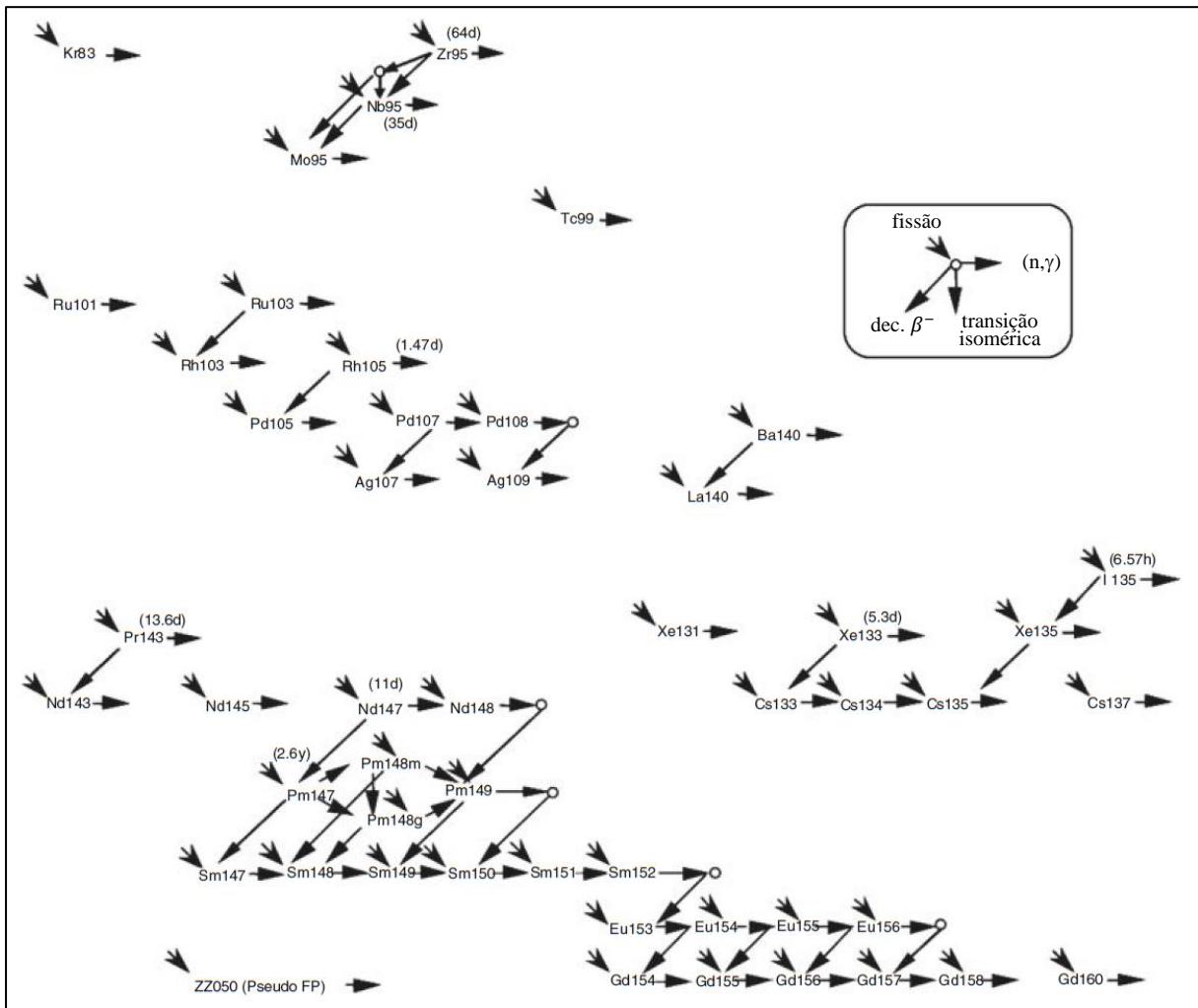


Figura 9: Cadeias desenvolvidas incluindo ^{105}Rh e o ^{105}Pd do código MVP-BURN (OKUMURA et al. 2000, 2007; CACUCI (2010)).

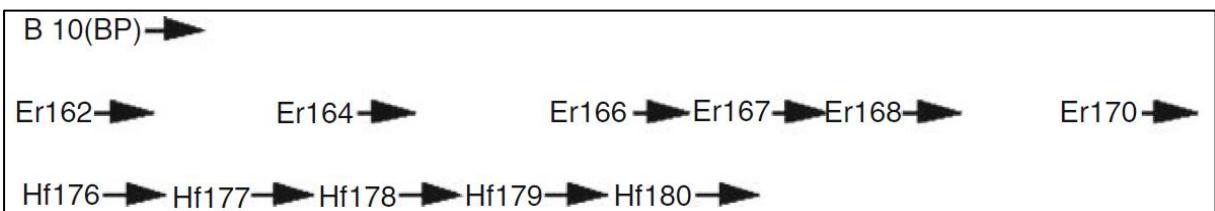


Figura 10: Cadeia de queima do código MVP-BURN para nuclídeos venenos queimáveis (cadeia de queima padrão) (OKUMURA et al. 2000, 2007; CACUCI (2010)).

2.3.3. Equação de Queima na Formulação Geral

De modo geral, a produção ou desintegração de um nuclídeo é descrita por:

$$\frac{dN_i}{dt} = \text{taxa de produção} - \text{taxa de absorção} - \text{taxa de decaimento}$$

que na forma de uma equação de queima é escrita como segue:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j \gamma_{ji} \sigma_{f,i} N_j \phi + \sigma_{c,i-1} N_{i-1} \phi + \sum_k \lambda_{ki} N_k - \sigma_{a,i} N_i \phi - \lambda_i N_i , \quad (15)$$

onde:

N_i : número de densidade (densidade atômica) do nuclídeo i [cm^{-3}];

γ_{ji} : produção de nuclídeo j devido à fissão de nuclídeo i [−];

$\sigma_{f,i}$: seção de choque microscópica de fissão do nuclídeo j [cm^2];

ϕ : fluxo de nêutrons [$cm^{-2}s^{-1}$];

$\sigma_{c,i-1}$: seção de choque microscópica de captura de nuclide $i - 1$ [cm^2];

λ_{ki} : constante de decaimento do nuclídeo k para o nuclídeo i [s^{-1}];

λ_i : constante de decaimento do nuclídeo i [s^{-1}];

$\sigma_{a,i}$: seção de choque microscópica de absorção do nuclídeo i [cm^2].

O primeiro termo no lado direito da Eq. 15 mostra a produção direta de uma fissão. Quando o nuclídeo i não é um produto de fissão, este termo é zero. O segundo termo é a produção devido à captura de nêutrons, isto é, reação (n, γ). O terceiro termo é a produção devido ao decaimento de outros nuclídeos considerando os decaimentos α e β . Os quarto e último termos são a desintegração pela absorção de nêutrons e o decaimento, respectivamente. Pode-se observar que a Eq. 15 não é realmente uma formulação rigorosa, uma vez que algumas reações nucleares foram omitidas. Por exemplo, as reações ($n, 2n$), ($n, 3n$) e (n, p) não foram levadas em consideração. Se essas reações forem importantes, elas também devem de ser consideradas como termos adicionais na Eq. 15.

Quando as densidades atômicas dos nuclídeos são consideradas como um vetor, a Eq. 15 pode ser escrita de uma forma mais geral:

$$\frac{d\vec{N}}{dt} = [A]\vec{N}, \quad (16)$$

onde:

\vec{N} : vetor da densidade atômica dos nuclídeos:

$[A]$: a matriz de queima.

Quando os nuclídeos no vetor \vec{N} são organizados em ordem de massa atômica (os produtos de fissão mais leve aparecem primeiro, em seguida, os produtos de fissão pesados e, finalmente, os nuclídeos pesados).

A solução analítica de Eq. 16 é formalmente dada pela seguinte fórmula, quando o elemento da matriz de queima é constante:

$$\vec{N}(t) = \vec{N}(0)\exp[At], \quad (17)$$

o termo $\exp[At]$ é chamado de matriz exponencial, mas sua expressão analítica para um caso geral não pode, infelizmente, ser obtida. Uma solução numérica é, portanto, inevitável em cálculos de queima. Os seguintes métodos numéricos são comumente utilizados para resolver a Eq. 16: método de Euler, método *Runge-Kutta*, método da matriz exponencial, método de decomposição da matriz, método *Bateman*, a aproximação de Padé, que é um método numérico geral usado para resolver a matriz exponencial, e o método de subespaço de *Krylov*, que é adequado para estimar a matriz exponencial de uma matriz esparsa.

2.3.4. Unidades de Queima

A queima é expressa como a produção cumulativa de energia por unidade de peso do carregamento inicial de metais pesados. Uma vez que a liberação cumulativa de energia de um combustível nuclear é muito grande, MWd/t ou GWd/t é comumente usado como a unidade de queima. A ISO (International Organization for Standardization) indica que o “M” (mega, 10^6), “G” (giga, 10^9) e “W” (Watt) devem ser escritos em letras maiúsculas, enquanto

o “d” (dia) e o “t” (Tonelada) devem ser escritos em minúsculas (no manual do código WIMSD-5B a tonelada é representada pela sigla “te”. O valor de 1 MWd/t indica que 1 t de metal pesado sustenta a produção de 1MW em energia por 1 d e que um valor de 1 GWd/t mostra que 1 t de metal pesado sustenta a produção de 1 GW de energia por 1 d. A unidade de queima adotada nesta dissertação é a representada por MWd/t.

É preciso ter cuidado ao definir o peso do metal pesado usado durante a queima. Uma vez que o peso do metal pesado diminui durante a queima devido às reações de fissão, o peso do metal pesado no carregamento inicial (isto é, início da vida útil) é utilizado para a definição de uma unidade de queima. Os físicos também utilizam outra unidade que é a fração de queima ou a queima por fissão: o número de fissões normalizadas para o número inicial de núcleos pesados, isto é, a proporção de núcleos pesados colocados no núcleo que foram submetidos à fissão diretamente ou após a conversão. Seria possível verificar que:

$$1\% \text{ fração de queima} \cong 10\,000 \text{ MWd/t.}$$

CAPÍTULO 3

3. METODOLOGIA

Nesta seção é apresentada a metodologia empregada a qual é essencialmente a aplicação do código de célula WIMSD-5B. Portanto, nas próximas subseções são descritos os principais conjuntos de dados de entrada necessários para executar o código, quais sejam: a descrição da célula equivalente e as bibliotecas de dados nucleares avaliados.

3.1. CÉLULA EQUIVALENTE PARA COMBUSTÍVEL TIPO PLACA

Em uma seção transversal do núcleo heterogêneo de um reator, existe sempre uma figura geométrica que se repete periodicamente formando a parte ativa do reator, essa figura é chamada de Célula Geométrica (AGHINA, 2011, CLARO, 2005). Esta menor unidade representativa do núcleo do reator em termos de sua reatividade, é composta da seção reta da placa combustível, para um reator com combustível tipo placa, e da área do moderador/refrigerante relacionada a este combustível. Esta área do moderador se caracteriza como sendo nula nos seus limites (meio distância entre as placas), a corrente líquida de nêutrons (entrada - saída = 0).

Considera-se, para o estudo da célula, que a altura do reator é infinita, isto é, o núcleo do reator é representado por volumes periódicos constituídos pela seção reta da célula geométrica e uma altura unitária por onde os fluxos de nêutrons não variam. Assim, só é necessário estudar a variação dos fluxos de nêutrons ao longo da célula geométrica, que é o “peso”, em termos neutrônicos, de cada uma de suas regiões, necessário a homogeneização da célula geométrica e consequentemente do elemento combustível e de todo o núcleo do reator. Em suma, por meio da especificação da célula geométrica, é possível transformar o núcleo heterogêneo de um reator em homogêneo e efetuar os cálculos referentes à ao transporte de nêutrons do reator sem maiores problemas.

Uma vez determinada a célula geométrica do núcleo de um reator e que pode ter seus limites irregulares, é necessário transformá-la para uma geometria de contornos simples a fim de se poder aplicar os métodos de cálculos pertinentes, que neste trabalho é o código

WIMSD-5B. Nesta célula, as sub-áreas equivalentes, de geometria simples, devem ter as mesmas relações de áreas que as correspondentes da célula geométrica. As sub-áreas primárias são a da seção reta do combustível (miolo + revestimento) e a do moderador, a ele correspondente. Esta célula, chamada de célula equivalente se apresenta na geometria retangular ou circular, conforme o combustível do reator esteja na forma de placas ou tubos.

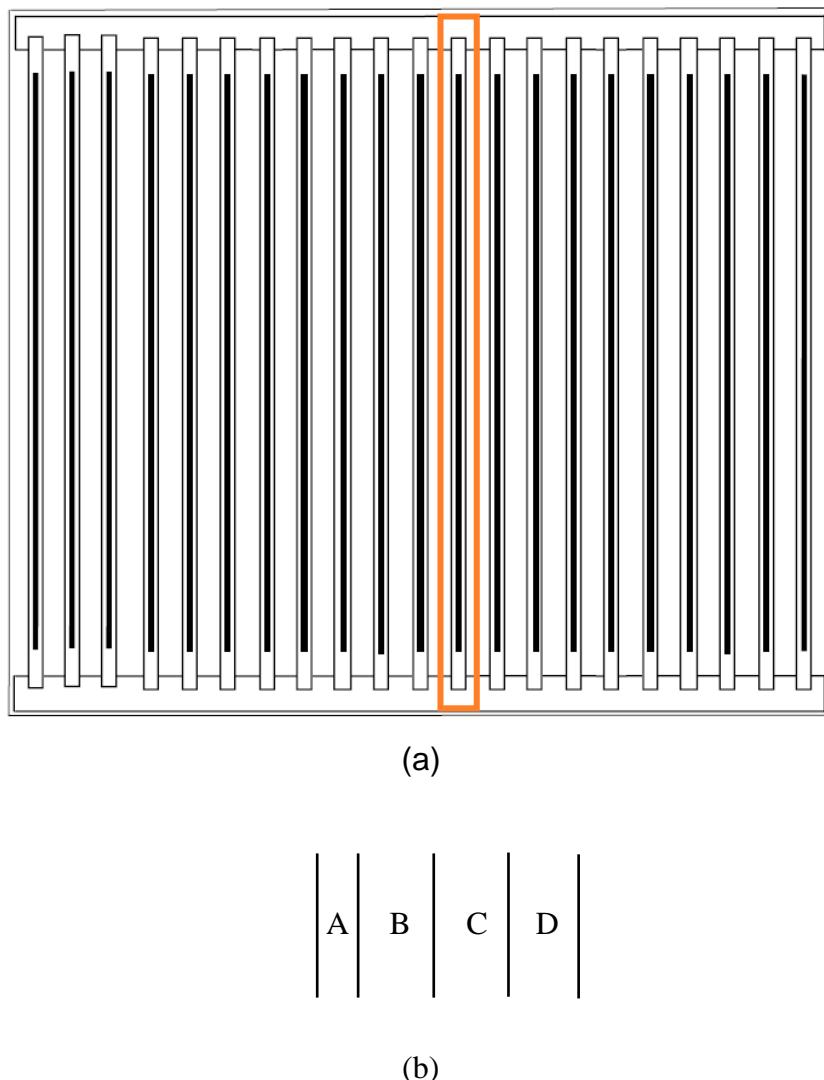


Figura 11: (a) Célula geométrica, destaque em laranja, de um elemento combustível tipo placa; (b) Célula Equivalente, representativa da célula geométrica: A= Miolo, B= Revestimento, C= Água, D= Excesso de Água + Alumínio.

No caso de um reator de pesquisa com combustível tipo placa, a geometria da célula

equivalente se apresenta na forma da seção reta de lâminas justapostas, partindo do combustível (placa), moderador e outros materiais ($\text{Al} + \text{H}_2\text{O}$, por exemplo), isto é, uma série de delgados retângulos justapostos abrangendo os diferentes materiais que formam o seu núcleo e em posições tais a manter suas respectivas importâncias em termos neutrônicos. A Figura 14 mostra a célula geométrica e a célula equivalente associadas à um elemento de combustível tipo placa de um típico reator de pesquisa, com revestimento de alumínio e moderado por água.

3.2. AS BIBLIOTECAS DE DADOS NUCLEARES AVALIADOS

Existem numerosas bibliotecas avaliadas de dados nucleares disponíveis a partir de vários centros de dados nucleares. Os interesses nacionais e as aplicações diferentes são os dois fatores principais que causam esta variedade. Países com programas nucleares fortes, como os EUA, a União Europeia, Japão, Rússia e China, desenvolvem suas próprias bibliotecas de propósito geral para manter a perícia de avaliação e garantir a independência tecnológica. Por outro lado, várias aplicações da tecnologia nuclear requerem bibliotecas com fins específicos que satisfazem necessidades particulares de uma dada aplicação.

Essas bibliotecas derivadas adicionam outra classe àquela mencionada acima. Deve também ter em conta várias versões (releases) das principais bibliotecas. A partilha frequente de avaliações entre diferentes bibliotecas, muitas vezes com algumas modificações, torna este quadro ainda mais complicado (CACUCI, 2010).

As bibliotecas de aplicação geral não se limitam a nenhuma aplicação específica e destinam-se a satisfazer uma ampla classe de usuários. Na prática, no entanto, elas muitas vezes surgiram como bibliotecas para aplicações específicas de reator. As avaliações em uma biblioteca de aplicação geral são geralmente mais completas em termos de quantidades físicas e de reações nucleares. Elas têm de ser adequadas para cálculos de transporte e, como tal, têm de cumprir requisitos bastante rigorosos quanto à integridade e consistência.

Assim, as avaliações do comportamento dos nêutrons têm de cobrir a ressonância térmica, resolvida e não resolvida, bem como as radiações gama de nêutrons rápidos que se estendem pelo menos até 20 MeV, e devem conter todos os principais canais de reações, fornecem seções de choque e possivelmente distribuições angulares, seções de choque

correlacionadas com ângulo de energia e dados de produção de fótons. A consistência interna implica que as seções de choque individuais devem somar as seções de choque total e as integrais dos espectros de emissão correspondente à respectiva seção de choque da reação. Tipicamente, as bibliotecas de aplicação geral são extensivamente validadas contra medições integrais.

Às vezes, os resultados dessas medidas integrais são incorporados a uma biblioteca. Este procedimento introduz correlações implícitas entre várias reações e materiais fazendo com que tal biblioteca se torne uma entidade ao invés de uma simples coleção de avaliações individuais. As principais bibliotecas de aplicação geral são mantidas pelos seguintes países:

1. USA – ENDF/B-VII.1, lançada em 2011;
2. Europe – JEFF-3.1, lançada em 2005, JEF-2.2, lançada em 1992;
3. Japan – JENDL-3.3, lançada em 2002, JENDL-4.0, lançada em 2010;
4. Russia – BROND-2.2, lançada em 1992; BROND-3 ainda não foi concluída, é parcialmente disponível nas avaliações selecionadas de ROSFOND, que foi lançada em 2008;
5. China – CENDL-2, lançada em 1991; CENDL-3 foi desenvolvida, mas não internacionalmente liberada; Desenvolvimento de CENDL-4 está em andamento.

Durante a primeira década do século XXI, três bibliotecas de dados nucleares avaliadas (ENDF/B, JEFF e JENDL) foram continuamente atualizadas e aprimoradas. Essas bibliotecas serão brevemente resumidas mais adiante nesta seção.

3.2.1. O Formato ENDF-6

A utilização do formato ENDF-6 é comum para a maioria das bibliotecas de dados nucleares avaliadas. Somente algumas das bibliotecas de ativação e derivadas desviam deste padrão. Caso contrário, todas as bibliotecas estão usando o formato ENDF-6 que foi aceito internacionalmente. Esta unificação teve um grande impacto na cooperação mundial, facilitada pela troca de arquivos entre as bibliotecas nacionais e pela fácil comparação dos dados. O formato ENDF foi desenvolvido pelo CSEWG e é mantido pelo NNDCC.

O trabalho começou em 1966, a primeira versão foi lançada em 1968, e depois em 1970, 1972, 1975, 1979 e 1990 juntamente com os lançamentos subsequentes da biblioteca US ENDF. A versão atual, ENDF-6 (HERMAN e TRKOV, 2009), tem sido usada tanto para a biblioteca ENDF/B-VI como para a ENDF/B-VII, o que implica que uma nova versão do formato não foi desenvolvida para o ENDF/B-VII. Observamos que para diferenciá-lo da biblioteca que é indicada com numerais romanos (digamos, ENDF/B-VI), o formato ENDF é sempre denotado com o numeral arábico (ENDF-6).

Por razões históricas, o formato ENDF-6 utiliza registros de 80 caracteres de acordo com as versões antigas do FORTRAN. É organizado em uma estrutura hierárquica estrita. Qualquer biblioteca é uma coleção de avaliações materiais de um grupo de avaliação reconhecido. O formato ENDF-6 é dividido em sub-bibliotecas que se distinguem entre diferentes partículas incidentes e tipos de dados, nomeadamente, reações induzidas por nêutrons, reações induzidas por prótons, dados de dispersão térmica, rendimentos de fissão, dados de decaimento, etc.

Uma avaliação é o processo de analisar parâmetros físicos medidos experimentalmente (como secções de choque), combinando-as com as previsões de cálculos de modelos nucleares e tentando extrair os valores verdadeiros de tais parâmetros. O processo de parametrização e redução dos dados para a forma tabular produz um conjunto de dados avaliado.

As sub-bibliotecas contêm os dados para diferentes materiais identificados por números MAT. Cada avaliação de material contém blocos de dados denominados "Files" e indicados com números MF. Uma descrição detalhada do formato ENDF-6 pode ser consultada em HERMAN e TRKOV, 2009.

3.2.2. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados ENDF/B

O *Cross Section Evaluation Working Group* (CSEWG) lançou a biblioteca ENDF / B-VII.1 em 22 de dezembro de 2011. A biblioteca ENDF / B-VII.1 é o mais recente arquivo de dados nucleares avaliado e recomendado para uso em aplicações de ciência e tecnologia nuclear, e incorpora avanços nos cinco anos desde a liberação de ENDF/B-VII.0, incluindo: muitas novas avaliações na sub-biblioteca de nêutrons (423 no total) e mais de 190 destas

contêm covariâncias, novos rendimentos de produtos de fissão e um grande expansão de dados de decaimento (CACUCI, 2010).

Na Tabela 1 abaixo é apresentado o conteúdo da biblioteca ENDF/B-VII.1, com ENDF/B-VII.0 e ENDF/B-VI.8 mostrados para comparação. NSUB significa o número da sub-bibliotecas no formato ENDF-6. Dado nas últimas três colunas estão o número de materiais (isótopos ou elementos). No Apêndice II são apresentadas informações adicionais para cada um dos 14 itens listados.

Tabela 1: Conteúdo da biblioteca ENDF/B-VII.1 comparado com as bibliotecas ENDF/B-VII.0 e ENDF/B-VI.8

No.	NSUB	Nome da Sub-biblioteca	Abrev.	ENDF/B-VII.1	ENDF/B-VII.0	ENDF/B-VI.8
1	0	Fotonuclear	g	163	163	-
2	3	Foto-atômico	photo	100	100	100
3	4	Decaimento radioativo	decay	3817	3838	979
4	5	Produção de Fissão Espontânea	s/fpy	9	9	9
5	6	Relaxação Atômica	ard	100	100	100
6	10	Nêutron	n	423	393	328
7	11	Produção de Nêutrons de Fissão	n/fpy	31	31	31
8	12	Espalhamento térmico	tsl	21	20	15
9	19	Padrões	std	8	8	8
10	113	Eletro-atômico	e	100	100	100
11	10010	Próton	p	48	48	35
12	10020	Deutério	d	5	5	2
13	10030	Trítio	t	3	3	1
14	20030	${}^3\text{He}$	he3	2	2	1

3.2.3. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados JEFF-3.1

O projeto JEFF é um esforço colaborativo entre os países membros europeus do Banco de Dados NEA. O objetivo inicial era melhorar o desempenho dos reatores e ciclos de combustível existentes. Mais recentemente, o objetivo é fornecer aos usuários um conjunto mais abrangente de dados para uma ampla gama de aplicações, incluindo o conceito de reator inovador (Gen-IV, 2014), a transmutação de resíduos radioativos, fusão e aplicações médicas. Estes dados incluem reações induzidas por nêutrons e prótons, decaimento radioativo, rendimentos de fissão, lei de espalhamento térmico e interações foto-atômicas.

A versão JEFF-3.1 da biblioteca foi lançada em maio 2005, para uma descrição resumida veja JEFF Report. 19 (JEFF3, 2005). A biblioteca combina os esforços dos grupos de trabalho JEFF e EFF/EAF (*European Fusion File / European Activation File*). A sub-biblioteca de uso geral de nêutrons contém 381 materiais de ^1H a ^{255}Fm . A sub-biblioteca de ativação é baseada no EAF-2003 e contém seções de choque para reações de nêutrons em alvos 774; A sub-biblioteca de decaimento radioativo contém três 852 isótopos dos quais apenas 226 são estáveis; A sub-biblioteca de prótons cobre 26 materiais de ^{40}Ca para ^{209}Bi ; A sub-biblioteca de lei de espalhamento térmica inclui nove materiais; A sub-biblioteca de rendimento de fissão de induzido por nêutrons cobre 19 isótopos de ^{232}Th a ^{245}Cm , e a sub-biblioteca de rendimento espontâneo de fissão contém $^{242},^{244}\text{Cm}$ e ^{252}Cf .

A biblioteca JEFF-3.0 foi melhorada principalmente devido à sub predição da reatividade dos sistemas LEU relevantes para reatores de água leve. A questão da reatividade foi ligada às seções de choque do ^{238}U e a avaliação melhorada foi obtida como resultado de amplo esforço internacional. Os cálculos de transporte demonstraram que as previsões desta reatividade foram sensivelmente melhoradas.

Novas avaliações ou revisões principais foram realizadas para isótopos Ti (IRK Viena); Isótopos Ca, Sc, Fe, Ge, Pb e Bi (NRG Petten); Isótopos ^{103}Rh , $^{127},^{129}\text{I}$ e Hf; E $^{236},^{237}$, ^{238}U e ^{214}Am (CEA). Para outros isótopos, foram adotadas avaliações mais recentes de outras bibliotecas. Dados de espalhamento térmico revisados foram produzidos para todos os materiais moderadores e estruturais importantes.

O projeto JEFF colocou um esforço considerável na validação da biblioteca, o que foi feito com especial cuidado do ponto de vista das aplicações dos reatores nucleares. O desempenho global da biblioteca é excelente.

3.2.4. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados JEF-2.2

A versão da biblioteca de aplicação geral foi lançada em Janeiro de 1992. A biblioteca contém avaliações de dados de reação de nêutrons para 313 elementos ou isótopos de ^1H a ^{99}Es na energia de nêutrons que varia de $10\text{E-}5$ eV a 20 MeV, no formato ENDF-6. Apesar de ser uma biblioteca que não foi muito atualizada, a mesma foi formatada para ser utilizada no código WIMSD-5B (IAEA, 2007).

3.2.5. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados JENDL-3.3 e JENDL-3.2

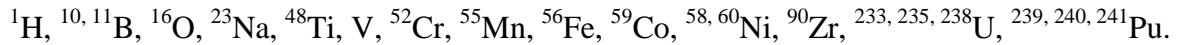
JENDL-3.3 é a biblioteca japonesa avaliada que foi lançada em 2002, ver o resumo de (SHIBATA et al. , 2002b). A biblioteca baseia-se amplamente em avaliações que se originaram no Japão, representando provavelmente a fonte mais extensa de avaliações independentes, logo após o esforço dos EUA.

O objetivo do esforço JENDL é fornecer dados japoneses avaliados para reatores reprodutores rápidos, reatores térmicos, neurônica de fusão, e cálculos de blindagem, bem como outras aplicações. A biblioteca JENDL-3.3 contém dados para 337 materiais, de 10^{-5} para 20 MeV.

As principais questões da versão anterior da biblioteca, JENDL-2.2, foram abordadas: a superestimação dos valores de criticalidade para os reatores de fissão térmica foi melhorada pela modificação das seções de choque de fissão e dos espectros de nêutrons de fissão para o ^{235}U ; Distribuições de energia incorretas de nêutrons secundários de materiais pesados importantes foram substituídas pelos resultados de um modelo estatístico; Inconsistência entre avaliações elementares e isotópicas foram removidas para os nuclídeos médios pesados.

JENDL-3.3 também contém covariâncias para 20 materiais mais importantes. Destes, 16 materiais foram originalmente desenvolvidos para o arquivo de covariância JENDL-3.2, disponibilizado em março 2002 (SHIBATA et al. , 2002b) e adotado pouco depois com

pequenas modificações por JENDL-3.3. Três materiais adicionais foram produzidos para JENDL-3.3, enquanto o material de dosimetria ^{55}Mn foi tomado. A lista de 20 materiais resultantes inclui actinídeos, materiais estruturais e nuclídeos leves, que são de interesse principalmente para aplicações de reator rápido:



A versão JENDL-4.0 da biblioteca foi lançada em 2011. Apenas a versão JENDL-3.2 foi formatada para o código WIMD-5B (IAEA, 2007).

3.2.6. Biblioteca de Dados Nucleares Avaliados IAEA

A ideia de um projeto para atualizar a biblioteca de entrada de dados nucleares multigrupo do código WIMS surgiu das discussões entre os participantes, palestrantes e diretores do Workshop Conjunto IAEA / ICTP sobre Cálculos de Física de Reatores para Aplicações em Tecnologia Nuclear realizado no ICTP, Trieste, de 12 de Fevereiro a 16 de Março de 1990. Esta ideia estava em sintonia com as conclusões e recomendações pertinentes da reunião do Comité Técnico sobre a Gestão do Combustível Intra-Núcleo (*Technical Committee Meeting on In-core Fuel Management*) realizada pela IAEA em Viena, de 4 a 7 de Dezembro de 1989 (IAEA, 2007).

O Projeto de Atualização de Bibliotecas WIMS (WLUP, WIMS Library Update Project) foi organizado pela Seção de Dados Nucleares da IAEA. O Instituto "Jozef Stefan" foi apoiado pela IAEA através de um contrato de pesquisa para coordenar as questões técnicas relacionadas com o projeto. Deve-se notar que, exceto para o trabalho de coordenação e algumas bolsas da IAEA, os participantes contribuíram para o projeto numa base voluntária.

O Subcomitê de Transferência de Tecnologia de Dados Nucleares da 19^a Reunião do INDC, de 8 a 12 de março de 1993, endossou firmemente a continuação do Projeto de Atualização de Bibliotecas do WIMS para disponibilizar seções de choque multi-grupo atualizadas no formato WIMS-D para reatores térmicos de pesquisa e de potência e afirmou que este projeto também estava em conformidade com os objetivos da Agência em matéria de transferência de tecnologia.

O projeto também foi recomendado pelos participantes da Reunião de Consultores da IAEA sobre processamento de dados nucleares realizada em 1993 e por especialistas de países em desenvolvimento que participaram do Workshop IAEA / ICTP sobre Cálculos, Projeto e Segurança de Reatores em 1994.

Em 1996, a Divisão de Física da IAEA tomou a iniciativa de criar o WLUP como um Projeto de Pesquisa Coordenado (CRP). Esse esquema organizacional acelerou o trabalho de conclusão da biblioteca WIMS-D atualizada e permitiu sua validação extensiva para cálculos de rede para reatores térmicos.

A fase final do WLUP como, Projeto de Pesquisa Coordenado (CRP) começou em dezembro de 1998, com contratos ou acordos de pesquisa para participantes de Argentina, Bangladesh, China, Cuba, Índia, Coréia, Marrocos, Polônia, Rússia, Eslovênia e EUA. Realizaram-se Reuniões de Coordenação de Pesquisa em Viena, Áustria (1999), Bariloche, Argentina (2000) e Viena, Áustria (2001).

Ao concluir o WLUP, os seguintes produtos ficaram disponíveis gratuitamente para usuários do WIMS-D:

1. Biblioteca de Seção de Choque com 69 grupos IAEA-WIMSD: incluem mais de 170 materiais de arquivos de dados nucleares selecionados avaliados em uma estrutura de energia de 69 grupos. A biblioteca foi amplamente validada em mais de 200 casos de referência;
2. Biblioteca de Seção de Choque com 172 grupos IAEA-WIMSD: Inclui mais de 170 materiais de arquivos de dados nucleares avaliados selecionados em uma estrutura de energia de 172 grupos. A biblioteca foi amplamente validada em mais de 200 casos de referência;
3. IAEA-TECDOC com documentação detalhada;
4. NJOY para processamento de dados nucleares avaliados;
5. “Benchmarks” de entradas para o código WIMS-D;
6. “Benchmarks” de resultados para as bibliotecas consideradas no WLUP;
7. Códigos auxiliares e procedimentos para atualizar e manter a biblioteca WIMS-D;
8. Atualizações do WIMS-D para ampliar os recursos de código.

As bibliotecas citadas no item 6 são as seguintes:

ENDFB-VII.1, ENDFB-VII.1GX, ENDFB-VII.0, ENDFB-VII.0GX, ENDFB-VI.0, ENDFB-VI.0GX, JENDL3.2, JENDL3.2GX, JEF2.2, JEF2.2GX, JEFF3.1 e JEFF3.1GX. O “GX” significa que são bibliotecas de dados nucleares avaliados considerando 172 grupos de energia.

3.3. O CÓDIGO WIMSD-5B

O WIMS (*Winfirth Improve Multigroup Scheme*) é um código determinístico, que se baseia na teoria de transporte para calcular o fluxo como uma função da energia e posição na célula, realizando cálculo para diferentes geometrias, fornecendo parâmetros físicos necessários ao desenvolvimento de projetos de reatores nucleares de diversos tipos. Desde a década de 60 tem logrado êxito nos seus resultados, ademais é bastante aceito internacionalmente, sendo um dos mais utilizados no gerenciamento de núcleo de reatores nucleares. Sua biblioteca padrão possui dados de seções de choque a multigrupo dos materiais mais utilizados em reatores nucleares.

Entre as várias versões do WIMS podem ser destacadas: LWRWIMS, WIMSD e WIMSE. As versões WIMSD não possuem caráter comercial e são disponibilizadas pela Agência de Energia Nuclear (NEA) Data Bank. O código em todas as versões foi desenvolvido para uma biblioteca com um número máximo de 69 grupos de energia, cuja estrutura possibilita uma extensão do número de nuclídeos e conjuntos de dados de qualquer isótopo.

O código WIMSD-5B utiliza as bibliotecas de dados nucleares com a mesma estrutura de 69 grupos de energia do código original, WIMS-D, com 14 grupos rápidos entre 9.118 keV e 10 MeV, 13 grupos de ressonâncias entre 4 eV e 9.118 keV, e 42 grupos térmicos de 0 a 4 eV. A tabela 1 lista os limites de energia E_{max} de cada grupo.

Mais recentemente, com novas atualizações, o código agora tem bibliotecas com até 172 grupos de energia. Entre as várias bibliotecas disponíveis podem ser citadas as seguintes: WDN29, ENDFB-VII.1, ENDFB-VII.1GX, JENDL3.2, JENDL3.2GX, JEF2.2, JEF2.2GX, JEFF3.1, JEFF3.1GX, IAEA e IAEAGX (IAEA, 2007). O código WIMSD desenvolve o cálculo de células em quatro geometrias diferentes: células homogêneas, placas ou barras

cilíndricas, arranjos de barras ou placas (geometria *cluster*) e multi-células. Neste trabalho o cálculo foi feito a partir dos dados de uma célula unidimensional (*Slab*).

Alguns dos itens mais significativos produzidos pelos cálculos deste código são: o fator de multiplicação infinito, k_∞ , o fator de multiplicação efetivo, caso sejam informados os dados de fugas, taxas de reações dos isótopos presentes no cálculo, as constantes médias (conjuntos de seções de choque macroscópicas) da célula e do elemento combustível homogeneizado, bem como as concentrações finais dos nuclídeos e dos produtos de fissão nos casos de queima (SILVA, 2009).

No código WIMSD a equação de queima para cada material e isótopo i é escrita na seguinte forma:

$$\frac{dN_i(t)}{dt} = -(\lambda_i + \{RR\}_i^a)N_i(t) + \sum_k (t) q_{i,k'}(t)N_k(t) + \sum_k q_{i,k}(t) N_k(t) \quad (17)$$

Onde:

λ_i = Constante de decaimento do nuclídeo i ;

(t) = Concentração do nuclídeo i ;

$\{RR\}_i^a$ = Taxa de reação de absorção do nuclídeo i ;

q_{ik} = São os termos de produção calculados a partir do rendimento dos produtos de fissão i pela fissão do nuclídeo k , fração de produção captura gama e taxas de reações de fissão.

Tabela 2: Estrutura com 69 grupos de energia utilizada pelo código WIMSD-5B

Grupos Rápidos		Grupos de Ressonâncias		Grupos Térmicos	
Grupos	$E_{max.}(\text{eV})$	Grupos	$E_{max.}(\text{eV})$	Grupos	$E_{max.}(\text{eV})$
1	1.00000E+07	15	9.11800E+03	28	4.00000E+00
2	6.06550E+06	16	5.53000E+03	29	3.30000E+00
3	3.67900E+06	17	3.51910E+03	30	2.60000E+00
4	2.23100E+06	18	2.23945E+03	31	2.10000E+00
5	1.35300E+06	19	1.42510E+03	32	1.50000E+00
6	8.21000E+05	20	9.06899E+02	33	1.30000E+00
7	5.00000E+05	21	3.67263E+02	34	1.15000E+00
8	3.02500E+05	22	1.48729E+02	35	1.12300E+00
9	1.83000E+05	23	7.55014E+01	36	1.09700E+00
10	1.11000E+05	24	4.80520E+01	37	1.07100E+00
11	6.73400E+04	25	2.77000E+01	38	1.04500E+00
12	4.08500E+04	26	1.59680E+01	39	1.02000E+00
13	2.47800E+04	27	9.87700E+00	40	9.96000E-01
14	1.50300E+04			41	9.72000E-01
				42	9.50000E-01
				43	9.10000E-01
				44	8.50000E-01
				45	7.80000E-01
				46	6.25000E-01
				47	5.00000E-01
				48	4.00000E-01
				49	3.50000E-01
				50	3.20000E-01
				51	3.00000E-01
				52	2.80000E-01
				53	2.50000E-01
				54	2.20000E-01
				55	1.80000E-01
				56	1.40000E-01
				57	1.00000E-01
				58	8.00000E-02
				59	6.70000E-02
				60	5.80000E-02
				61	5.00000E-02
				62	4.20000E-02
				63	3.50000E-02
				64	3.00000E-02
				65	2.50000E-02
				66	2.00000E-02
				67	1.50000E-02
				68	1.00000E-02
				69	5.00000E-03

A descrição do código pode ser resumida em quatro passos: preparação dos dados, cálculo central, edição e cálculo de queima. Primeiramente, utilizando o método de teoria de colisão SPECTROX, o código calcula o espectro para algumas regiões espaciais, usando toda sua biblioteca de grupos de energia (69 ou 172 grupos) e usa esse espectro para colapsar as seções de choque para o número de grupos que será tomado para o próximo passo. No cálculo central, a equação de transporte é solucionada para um determinado grupo de energia e para uma geometria específica utilizando-se os métodos DSN ou da probabilidade de colisão. Na etapa da edição são feitas correções dos dados obtidos na etapa anterior, como por exemplo, correção de fuga, fator de multiplicação efetivo, *buckling* que torna o sistema crítico, e taxa de reações. Por fim é realizado o cálculo de queima. Completado estes passos, o processo pode ser repetido para a fase inicial ou encerrar. A Figura 12 apresenta um fluxograma com as principais etapas do código.

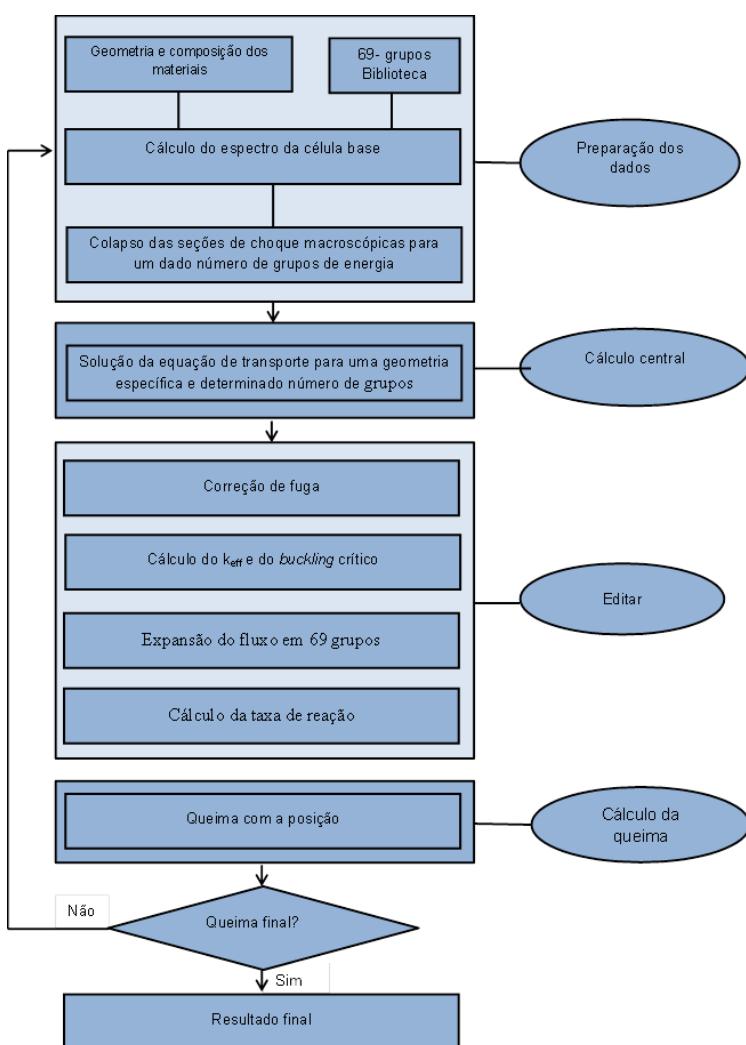


Figura 12: Principais etapas do código WIMSD-5B

A Figura 13 mostra as transições de decaimento e queima de actinídeos configurados na biblioteca WIMSD-IAEA, por exemplo. Os itens numerados na Figura 13 são descritos no Apêndice I.

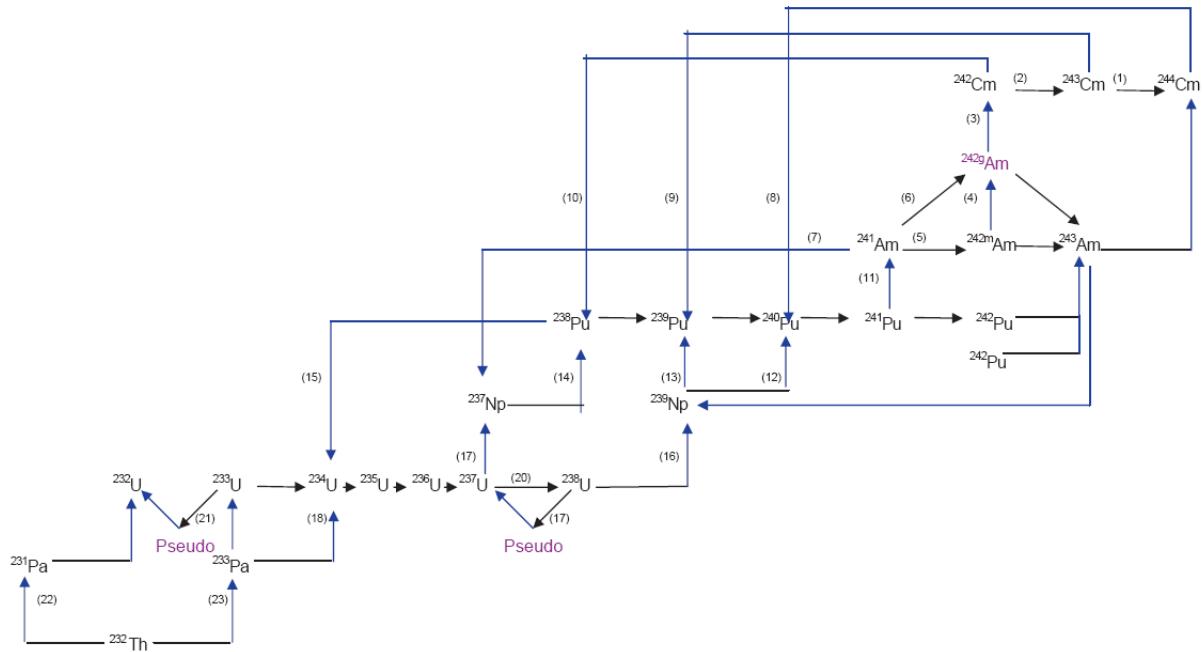


Figura 13: Transições de decaimento e queima de actinídeos implementadas na biblioteca WIMSD-IAEA.

Enquanto que a Figura 14 apresenta parte da cadeia dos produtos de fissão e transições de decaimento também configurado na biblioteca do WIMSD-IAEA.

Ainda na Figura 12 o termo pseudo, refere-se ao pseudo-produto de fissão e pode ser interpretado como um nuclídeo fictício que representa a média do comportamento dos produtos de fissão no decorrer da queima, conforme explicado na seção 2.3.2. São muitos os produtos de fissão que surgem com a queima e fazer a análise individual de todos torna-se inviável tanto no aspecto computacional como nos dados nucleares. Assim, os produtos que não são avaliados individualmente recebem um tratamento coletivo e a eles são atribuídas às propriedades médias de todos os produtos de fissão que eles representam.

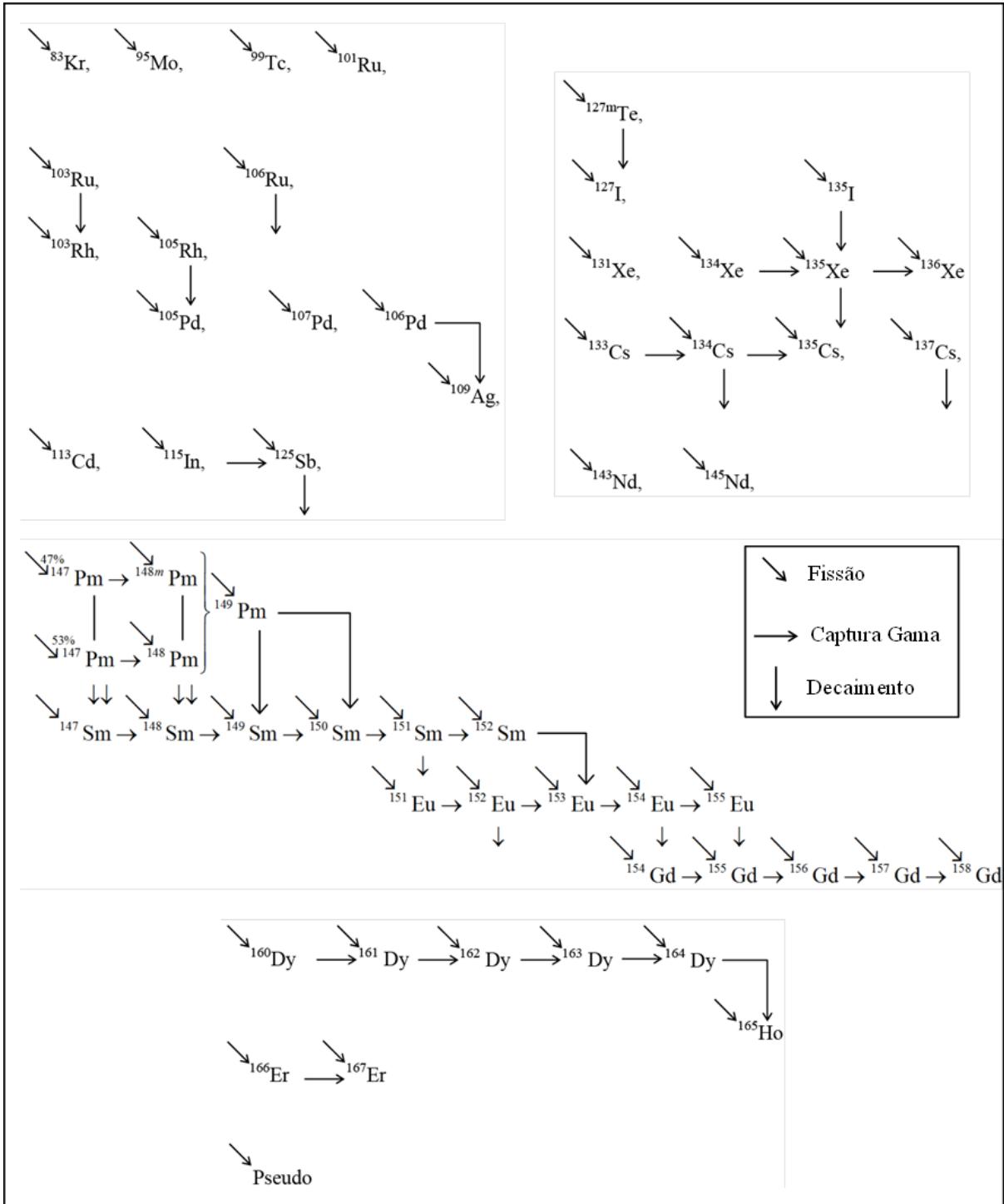


Figura 14: Cadeia de produto de fissão implementadas na biblioteca WIMSD-IAEA.

CAPÍTULO 4

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com o objetivo de simular a queima usando o código WIMSD-5B, foi considerado o reator de pesquisa MTR-IAEA do problema “benchmark” concebido pela IAEA. Esse reator de pesquisa é constituído por elementos combustíveis do tipo placa. Na década de 80 a IAEA coordenou um trabalho com a colaboração de diferentes organizações, com o objetivo de auxiliar os operadores de reator a determinar a viabilidade da conversão de reatores de alto enriquecimento de urânio (HEU) para baixo enriquecimento de urânio (LEU). Foi utilizado então, um típico reator de pesquisa e teste de materiais, o MTR, sendo simulados problemas de benchmark (IAEA-TECDOC-233, 1980).

Esse reator possui um núcleo ativo (altura) de 60 cm, cada elemento combustível tem dimensões laterais de 7,7cm X 8,1 cm. É um reator tipo piscina, seu combustível é composto de óxido de urânio disperso em Alumínio (UAl_x – Al) e potência de 10 MW. O elemento combustível (EC) é composto por 23 placas e o elemento de controle/segurança (ECS) 21 placas sendo 17 delas idênticas as do EC e as outras constituídas de Al puro.

A Figura 15 fornece a configuração inteira do núcleo do reator e a Figura 16 apresenta um corte vertical do núcleo.

Como afirmado anteriormente, um dos conjuntos de dados de entrada do código WIMSD-5B é relativa à geometria do núcleo e a sua composição material, informações que são concatenadas na chamada célula equivalentes.

4.1. Determinação da Célula Equivalente do MTR-IAEA

O núcleo do reator MTR-IAEA é heterogêneo, e pode-se identificar uma figura geométrica que se repete formando a parte ativa do núcleo.

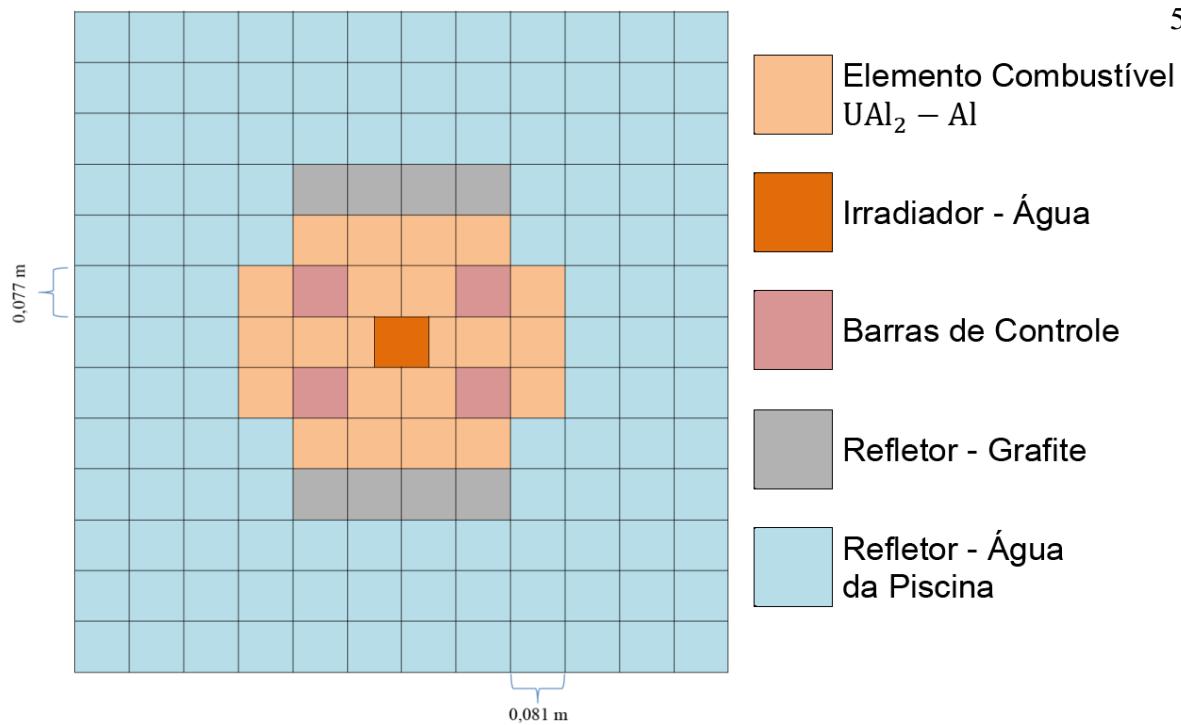


Figura 15: MTR-IAEA

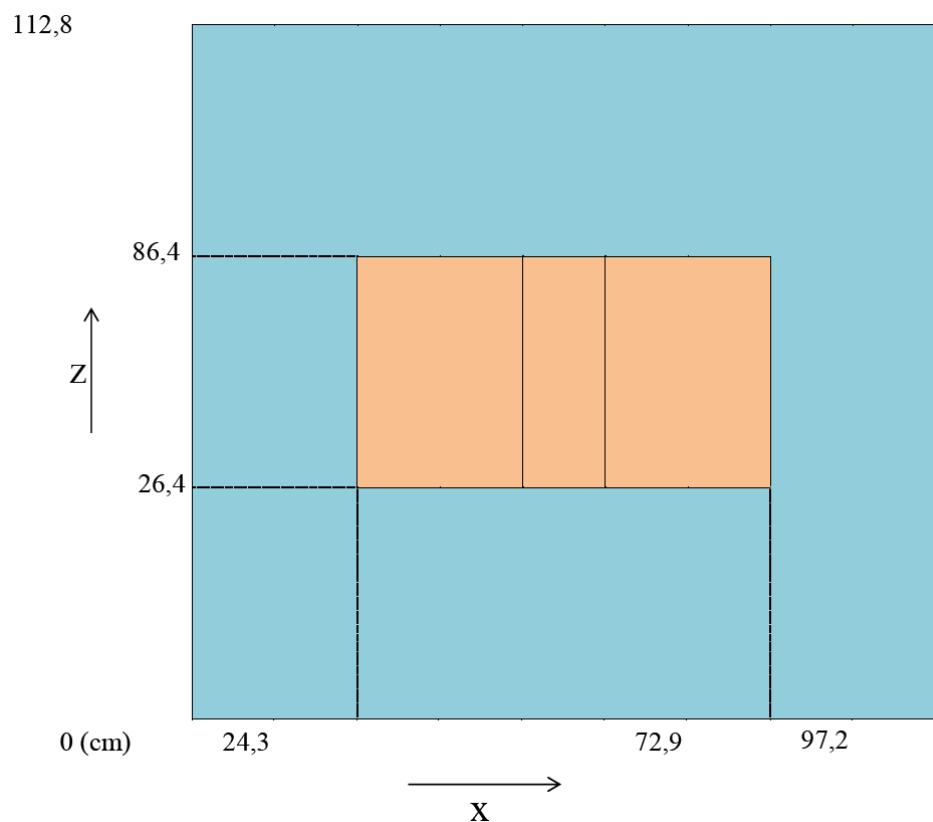


Figura 16: Vista lateral do MTR-IAEA

Considerando um Elemento Combustível (EC) do reator MTR-IAEA, com a sua geometria e composição material mostrada pela Figura 17 e Tabela 3, é possível associar ao EC uma célula equivalente a qual é composta de quatro regiões, conforme mostrada na Figura 20: a região 1, representando o combustível ou, também chamada de miolo; a região 2, representando o revestimento do combustível; a região 3 representando o refrigerante e moderador e a região 4 denominada região extra, contendo as bordas inertes de Al e o excesso de água.

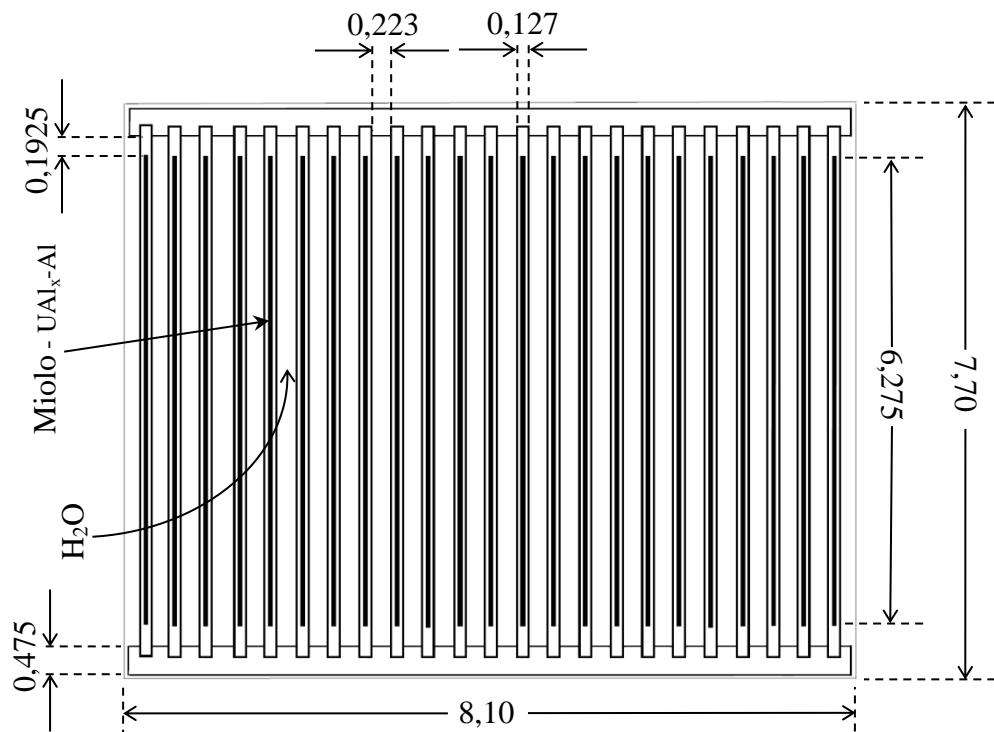


Figura 17: Sessão transversal do elemento combustível do reator de pesquisa MTR-IAEA (unidades em cm).

A macro-célula M é formada a partir da seção reta de um EC, sendo sua área composta pela soma das áreas A e B, conforme Figura 18. Nos limites dessa macrocélula as correntes líquidas de nêutrons são consideradas nulas. Essa macrocélula é representativa para todo o núcleo do reator.

Tabela 3: Dimensões e características do elemento combustível do reator de pesquisa - MTR-IAEA

Tipo do combustível - $UAl_x - Al$
72w/o (72 % “por peso) de Urânio no $UAl_x - Al$
Teor de ^{235}U no pó – 20 w/o (20 % “por peso”)
Massa de ^{235}U por EC (23 placas) – 390g
Massa de ^{235}U por placa – 16,95652g
Considera-se apenas o ^{235}U e ^{238}U no combustível fresco
Dimensões do Miolo – 6,275 cm x 0,051 cm x 60 cm

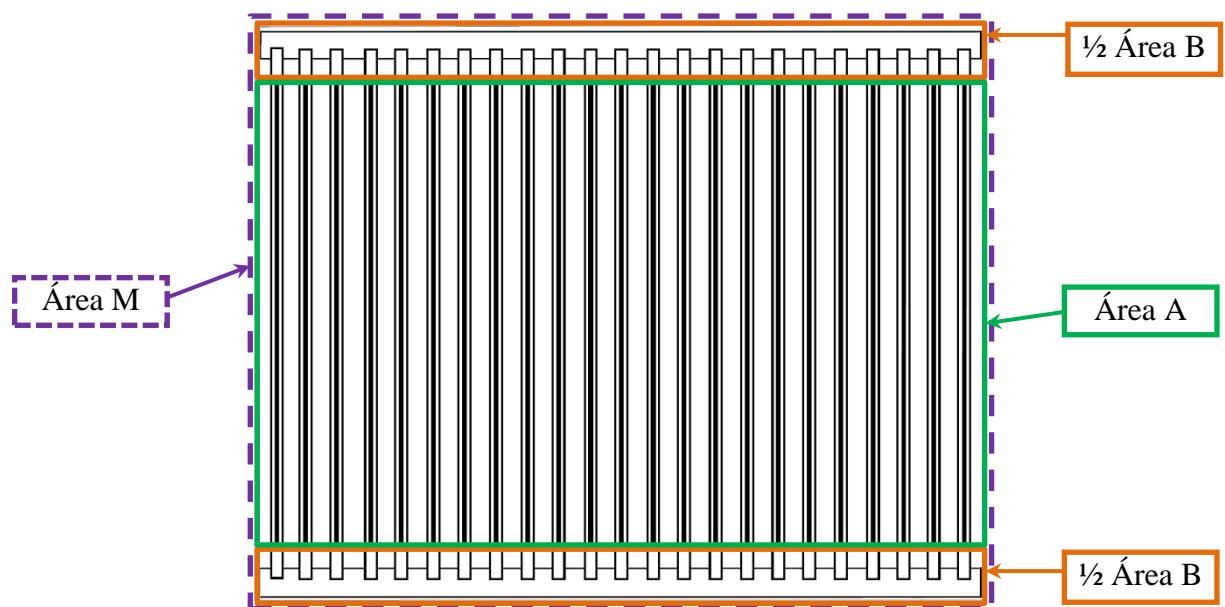


Figura 18: Macromolécula M do EC do MTR-IAEA.

4.1.1. Cálculo das áreas da Macrocelula M

Área A (área ativa) - contém as placas combustíveis e os canais de água.

$$6,275 \times 8,1 = 50,8275 \text{ cm}^2.$$

Área B (região extra) - contém as bordas inertes de Al e o excesso de água.

$$(7,7 \times 8,1) - 50,8275 = 11,5425 \text{ cm}^2,$$

$$\text{Área M} = A + B = 62,37 \text{ cm}^2.$$

4.1.2. Célula equivalente da macromolécula (M) – Me

Na célula Me, Figura 19, a área A engloba a placa combustível e $\frac{1}{2}$ canal de água de cada lado. A essa área são acrescentados os retângulos Be, que equivalem à área B da macrocelula M. A proporção entre as áreas é mantida pela Equação 18:

$$\frac{Ae}{2 Be} = \frac{A}{B} \quad (18)$$

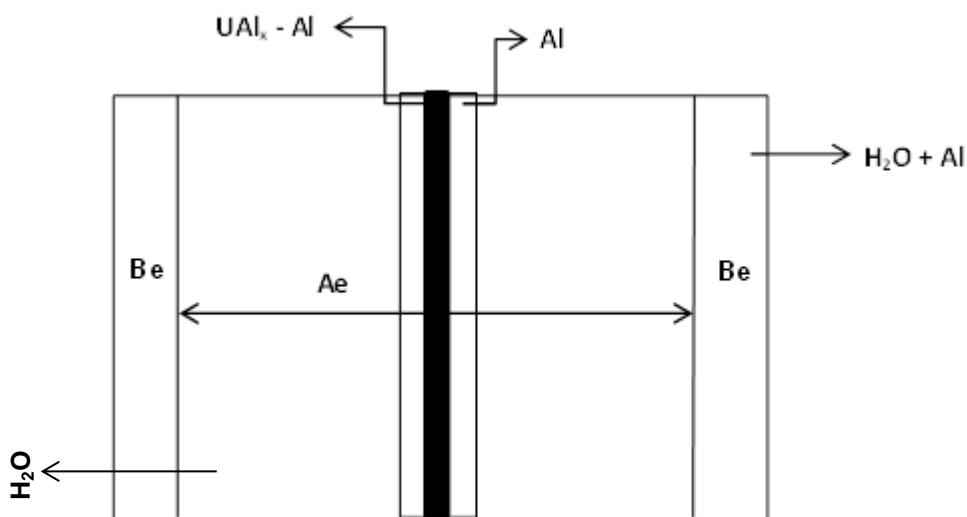


Figura 19: Célula equivalente Me.

4.1.3. Célula equivalente definitiva M

A célula Me pode ser representada, de uma forma mais simples ainda, pela célula Mee. Nesta, as áreas estão separadas por regiões com seus respectivos materiais constituintes, conforme a Figura 20.

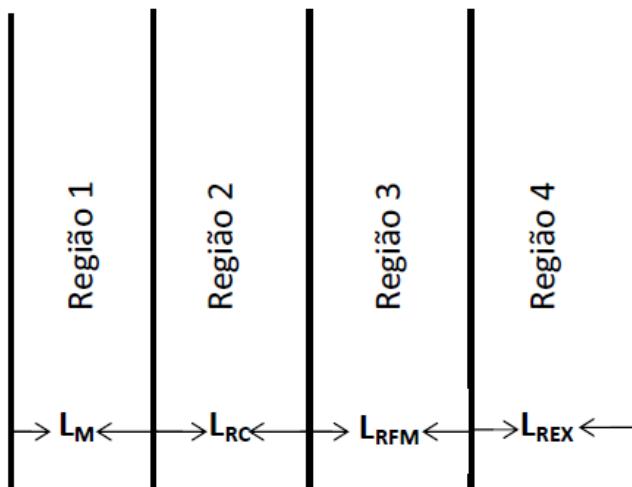


Figura 20: Célula equivalente definitiva Mee (espessura sem escala).

O cálculo das espessuras e das densidades atômicas da célula equivalente é apresentado no Apêndice III.

A Tabela 4 lista as regiões da célula equivalente, seus elementos e isótopos correspondentes e as espessura e concentrações atômicas calculadas para o EC do MTR-IAEA. Verifica-se nessa Tabela que os valores encontrados são muito próximos aos fornecidos pela referência em (IAEA, 1980).

Assim, com a obtenção desse conjunto de dados, formado pelas concentrações dos isótopos e pelas espessuras da célula equivalente, tem-se uma das partes dos dados de entrada, fornecida por um arquivo apropriado, para o código WIMSD-5B. A outra parte do “*input*” do código WIMSD-5B é formada pela biblioteca de dados nucleares avaliados, objeto da próxima seção.

Tabela 4: Densidades atômicas e espessuras da célula equivalente de elemento combustível do MTR-IAEA comparadas com os dados de referência

Regiões	Elementos e Isótopos	Densidades Atômicas (átomos/barn . cm)		Espessura (cm)	
		Referência (*)	Calculado	Referência (*)	Calculado
Região 1 Miolo (UAl_xAl)	^{235}U	$2,2536 \times 10^{-3}$	$2,26271 \times 10^{-3}$	0,0255	0,0255
	^{238}U	$8,9005 \times 10^{-3}$	$8,93652 \times 10^{-3}$		
	Al	$3,8171 \times 10^{-2}$	$3,83265 \times 10^{-2}$		
Região 2 revestimento	Al	$6,0260 \times 10^{-2}$	$6,02439 \times 10^{-2}$	0,038	0,038
Região 3 1/2canal de água	H	$6,6956 \times 10^{-2}$	$6,66739 \times 10^{-2}$	0,1115	0,1115
	O	$3,3428 \times 10^{-2}$	$3,33695 \times 10^{-2}$		
Região 4: bordas inertes de Al e excesso de água	Al	Sem valores disponíveis para comparação	$4,60492 \times 10^{-2}$	0,0402	0,0397
	H		$1,57441 \times 10^{-2}$		
	O		$7,87207 \times 10^{-3}$		

(*) Fonte: IAEA-TECDOC, 1980

4.2. Bibliotecas de Dados Nucleares Avaliados Utilizadas

Para as simulações com o código WIMSD-5B, foram utilizadas as seguintes bibliotecas de dados nucleares avaliados: IAEA, ENDFB-VII.1, JENDL3.2, JEFF3.1 e JEF2.2, para 69 grupos de energia e formatadas pelo WLUP, WIMS Library Update Project.

Para as bibliotecas IAEA, JENDL3.2, JEFF3.1 e JEF2.2 o código WIMD-5B, nas simulações da queima, fornece as concentrações de 78 nuclídeos enquanto que para a biblioteca ENDFB-VII.1, fornece as concentrações de 89 nuclídeos. Para fins de comparação, foram consideradas as concentrações dos 78 nuclídeos correspondentes a todas as bibliotecas, as 11 concentrações a mais que a biblioteca ENDFB-VII.1 possui não foram consideradas.

4.3. Simulação da Queima e Análises

A queima foi simulada durante um período de 400 dias, que corresponde a uma redução de 50% na concentração inicial do ^{235}U . As variações durante a queima das concentrações dos 78 nuclídeos para as cinco bibliotecas de dados nucleares avaliados foram

plotadas em gráficos e podem ser consultadas da Figura 11 até a Figura 88. Pode-se verificar que ao fim da simulação da queima, em 400 dias, as concentrações obtidas utilizando-se as cinco bibliotecas de dados nucleares avaliados não diferem na maioria dos casos. No entanto, nem todas as bibliotecas produziram resultados semelhantes nos seguintes casos relacionados: Cm-242, Figura 26; Cm-243, Figura 27; Dy-160, Figura 34; Dy-161, Figura 35; Dy-162, Figura 36; Dy-163, Figura 37; Dy-164, Figura 38; Ho-165, Figura 39; Er-166, Figura 40; Er-167, Figura 41; Ah-109, Figura 53; Te-127, Figura 57; I-127, Figura 58; Eu-152, Figura 82; Am-242, Figura 88.

Considerando um tempo de queima de 30 dias, que corresponde a um tempo mais real em termos de operação de um reator nuclear de pesquisa, com um enriquecimento de 20%, observa-se que as maiores diferenças nos resultados em função da biblioteca de dados nucleares utilizada foram nos seguintes casos: Gd-157, Figura 32; Er-167, Figura 41; Cd-113, Figura 54; Te-127m, Figura 57; I-127, Figura 58; Pm-147, Figura 70; Sm-149, Figura 77. Também é importante ressaltar as grandes variações nas concentrações nos primeiros passos de queima (período poucas horas) em todas as bibliotecas e observados nos seguintes casos: Np-239, Figura 17; Gd-157, Figura 32; Rh-105, Figura 49; Cd-113, Figura 54; I-135, Figura 63; Xe-135, Figura 65; Pm-149, Figura 76; Sm-149, Figura 77; Sm-151, Figura 79; U-237 PPF, Figura 87.

Com a finalidade de apresentar comparações em termos quantitativos, foram calculados os desvios relativos percentuais absolutos (DRPA) entre as concentrações encontradas para cada biblioteca de dados nucleares. As Tabelas de 8 a 14 relacionam os desvios relativos percentuais absolutos acima de 50%.

Além das variações das concentrações dos nuclídeos, também foram obtidos como resultados das simulações da queima com o código WIMSD-5B, a variação do fator de multiplicação infinito, k_{∞} , e os seguintes parâmetros nucleares condensados para dois grupos de energia: coeficientes de difusão, D_g ; seção de choque de absorção, Σ_{ag} ; seção de choque de remoção, Σ_{rg} ; e número médio de nêutrons de fissão multiplicado pela seção de choque de fissão, $v\Sigma_{fg}$.

Para essa condensação foram considerados os grupos térmicos de 0,625 eV (grupo 46) até 0,005 eV (grupo 69), da Tabela 1, para formarem o grupo térmico condensado ($g = 2$) e, consequentemente, os outros grupos da mesma Tabela para formarem o grupo rápido ($g = 1$) condensado. Na Figura 89 é mostrado o plete do gráfico da variação do k_{∞} em função da queima para cada biblioteca de dados nucleares e comparados com o resultado obtido com o código EPRI-CELL (IAEA, 1980), que foi utilizado com a biblioteca ENDFB-IV. Nesta figura o gráfico foi plotado com apenas alguns pontos.

Na Figura 90 é mostrado o plete do gráfico da variação do k_{∞} em função da queima para cada biblioteca de dados nucleares em todos os passos de queima (400 dias). Nas Figuras de 91 até 94 são mostrados os plotes dos gráficos das variações dos parâmetros nucleares do grupo rápido, enquanto que as Figuras de 95 até 98 mostram os plotes dos gráficos das variações dos parâmetros nucleares do grupo térmico.

Verifica-se que a variação do k_{∞} , Figura 90, é semelhante para cada biblioteca adotada, e o mesmo pode ser afirmado para o $v\Sigma_{fg}$ nos dois grupos de energia. Todavia, os parâmetros D_g , Σ_{ag} e Σ_{rg} mostraram um deslocamento nas curvas em função da biblioteca utilizada.

Também se observa que no gráfico da Figura 90 o k_{∞} varia de forma acentuada nos primeiros passos de queima. O mesmo pode ser observado nos parâmetros nucleares do grupo térmico.

Essas fortes variações estão relacionadas diretamente com os grandes aumentos nas concentrações do Xe-135, Figura 65, e Sm-149, Figura 77. O Xe-135 é o principal produto de fissão que afeta a operação do reator devido à sua alta seção de choque de absorção, no valor de $2,65 \times 10^6$ barns. Este isótopo pode ser produzido diretamente da fissão e também do decaimento de outros produtos de fissão. Sm-149 é outro produto de fissão de alta seção de choque de absorção, 41.000 barn.

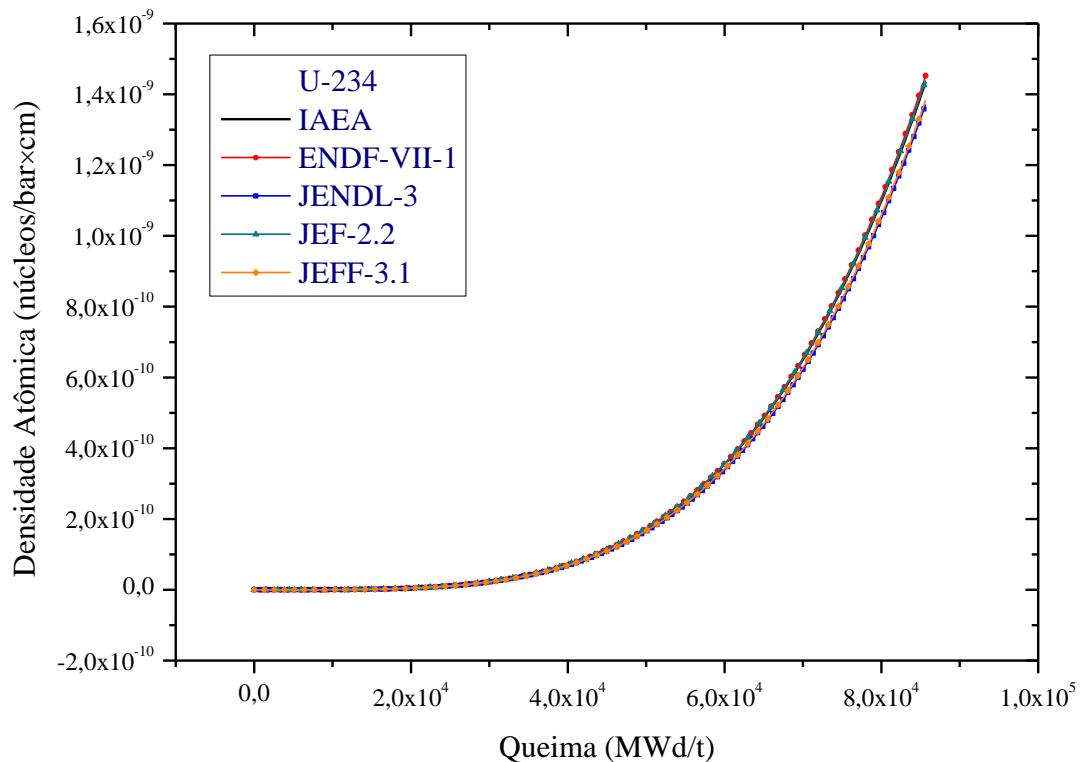


Figura 21: Variação de densidade atômica do ^{234}U em função da queima.

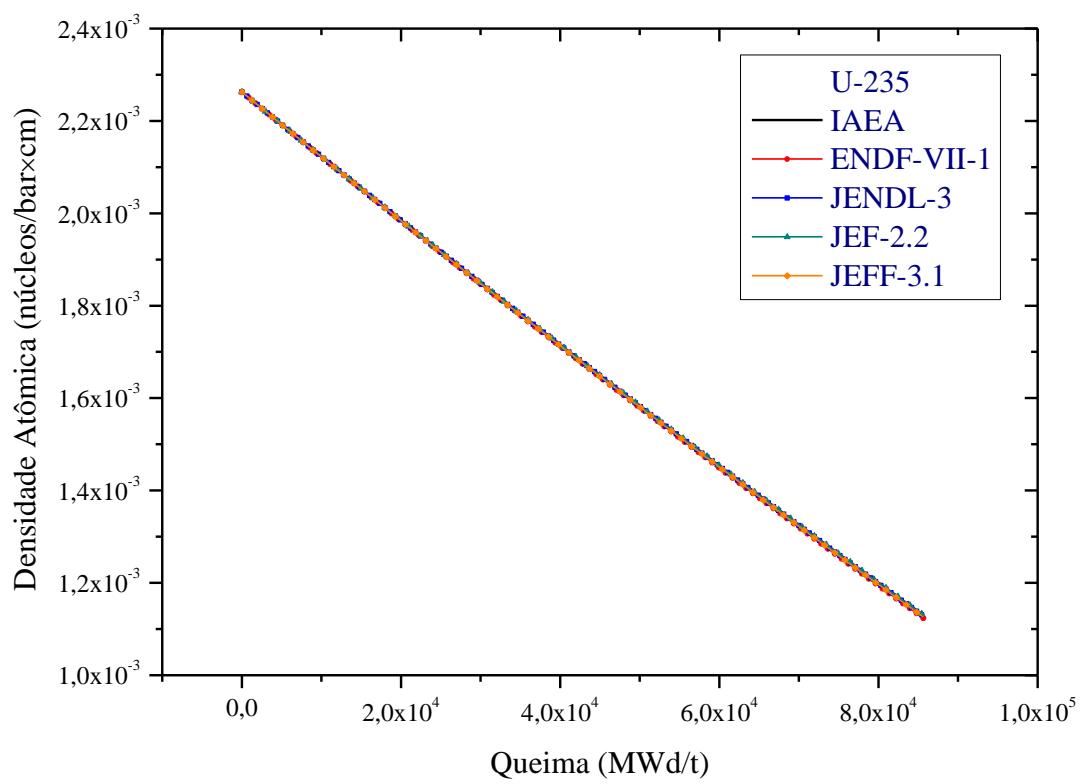


Figura 22: Variação de densidade atômica do ^{235}U em função da queima.

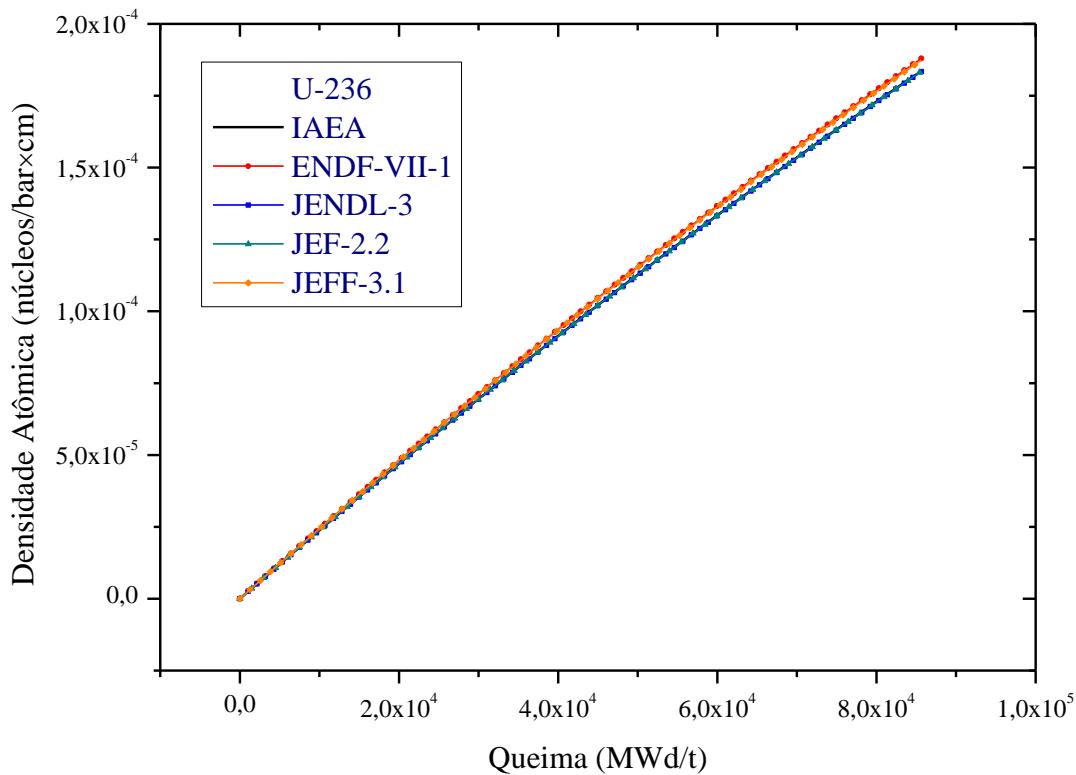


Figura 23: Variação de densidade atômica do ^{236}U em função da queima.

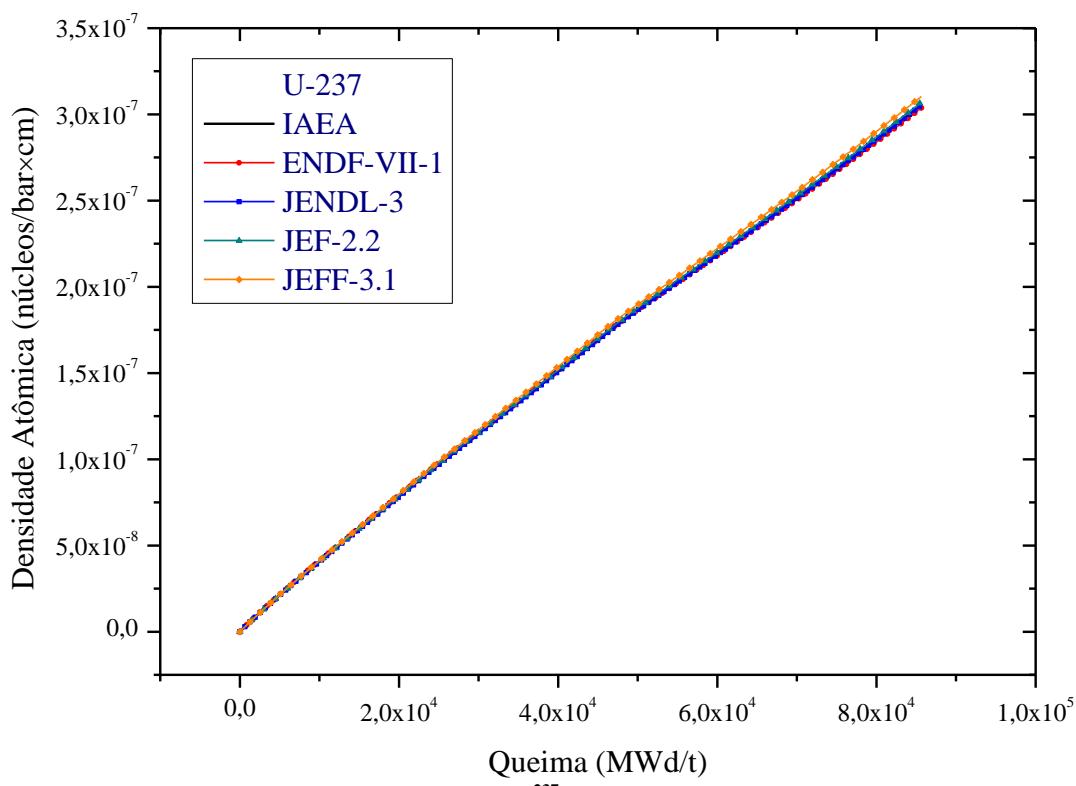


Figura 24: Variação de densidade atômica do ^{237}U em função da queima.

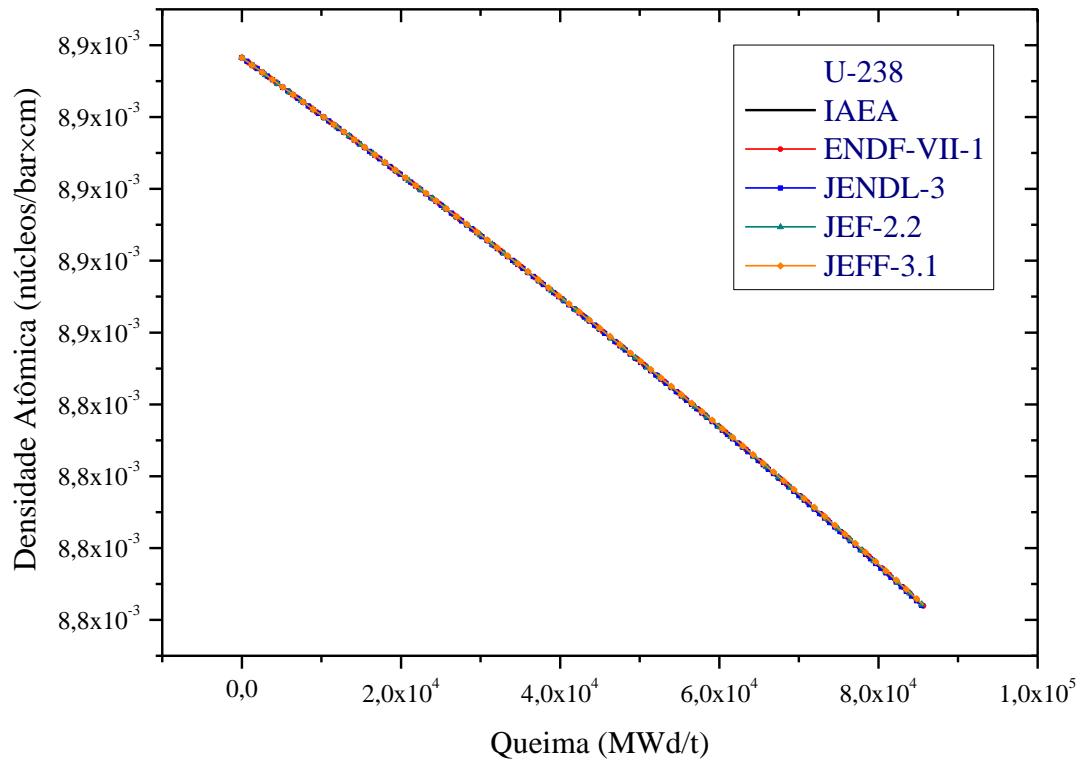


Figura 25: Variação de densidade atômica do ^{238}U em função da queima.

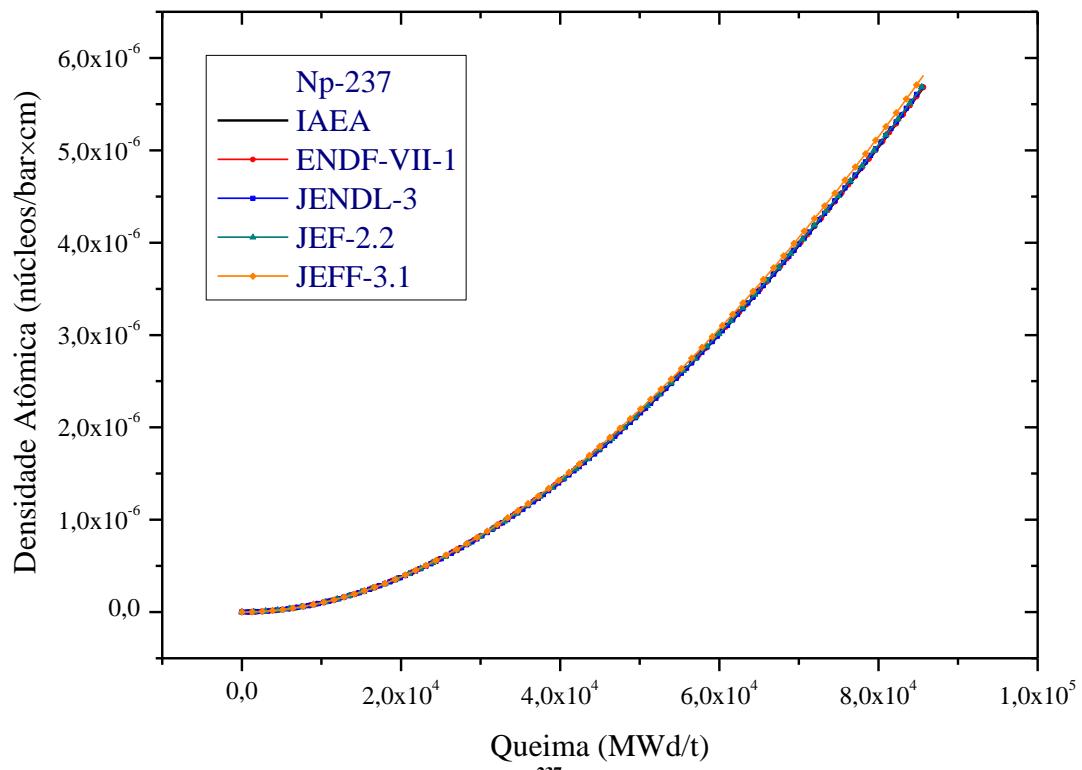


Figura 26: Variação da densidade atômica do ^{237}Np em função da queima.

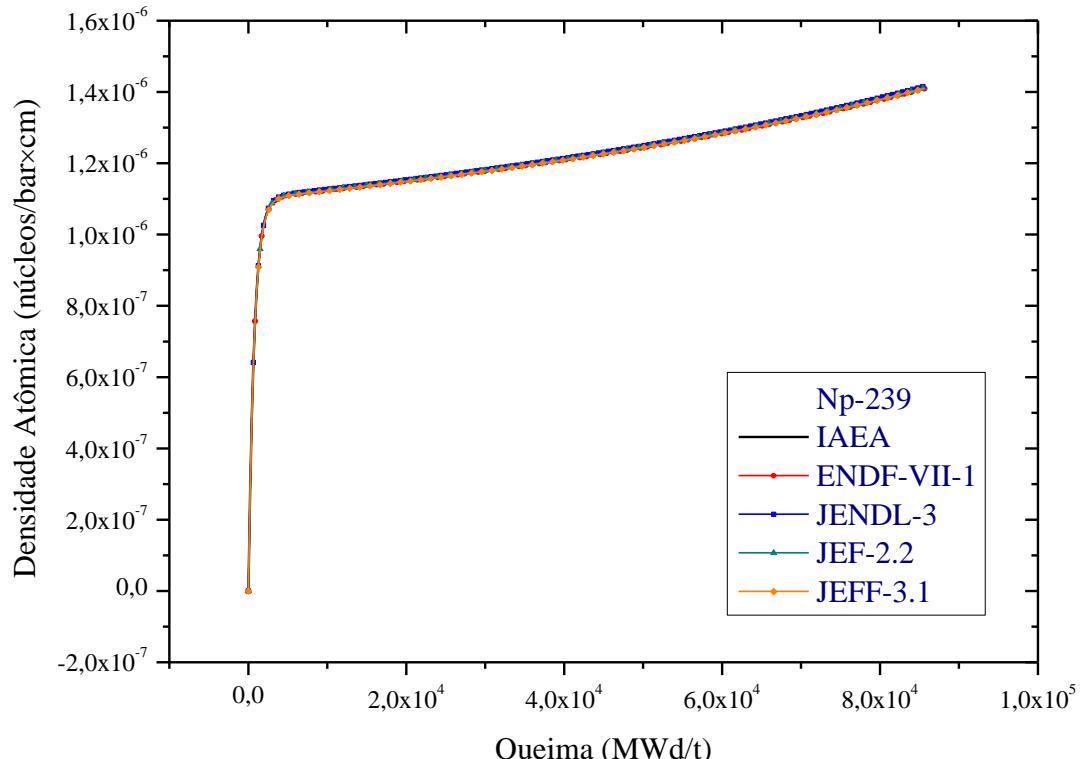


Figura 27: Variação de densidade atômica do ^{239}Np em função da queima.

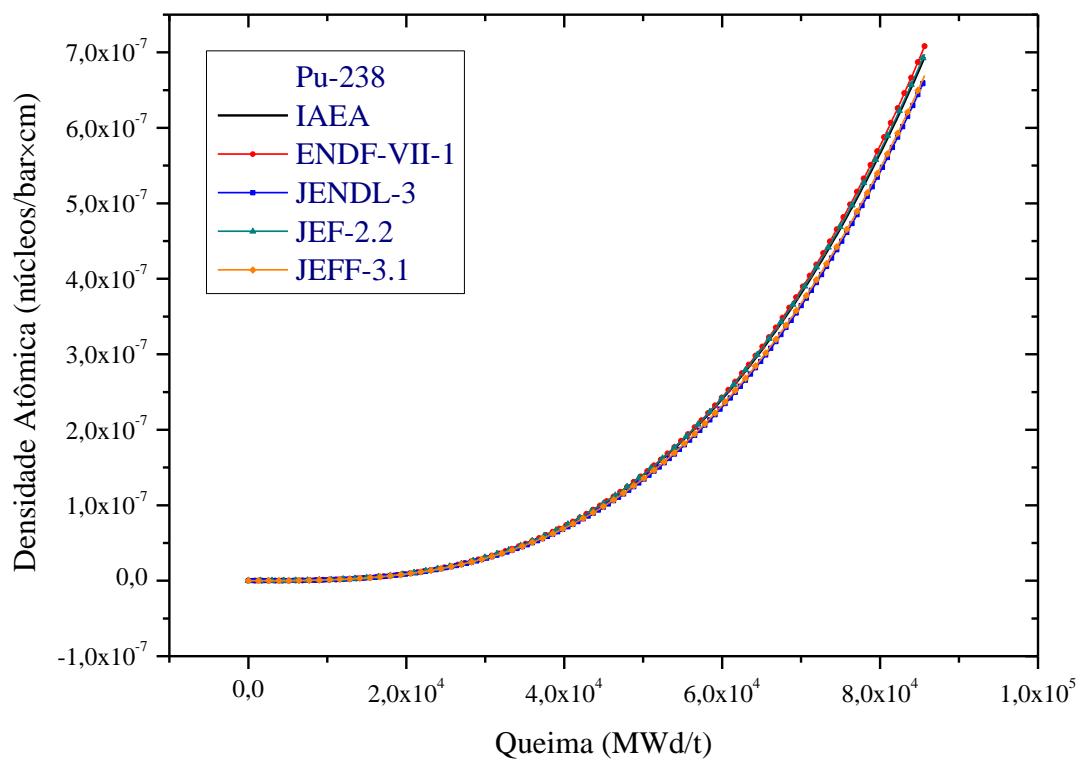


Figura 28: Variação de densidade atômica do ^{238}Pu em função da queima.

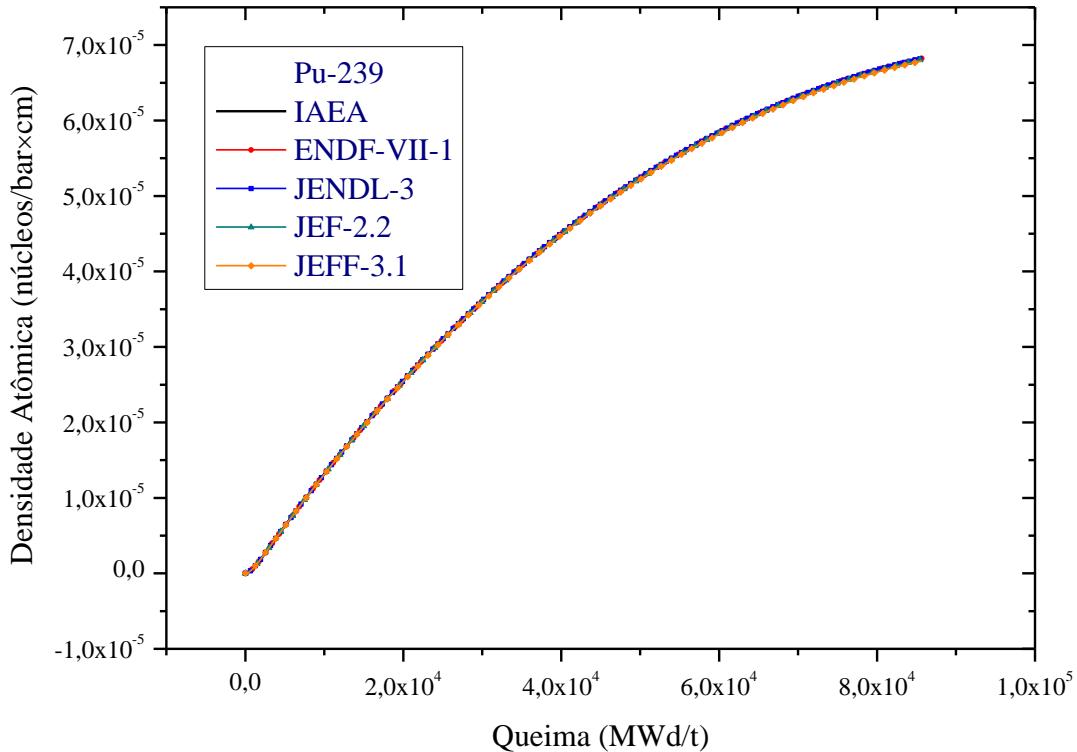


Figura 29: Variação de densidade atômica do ^{239}Pu em função da queima.

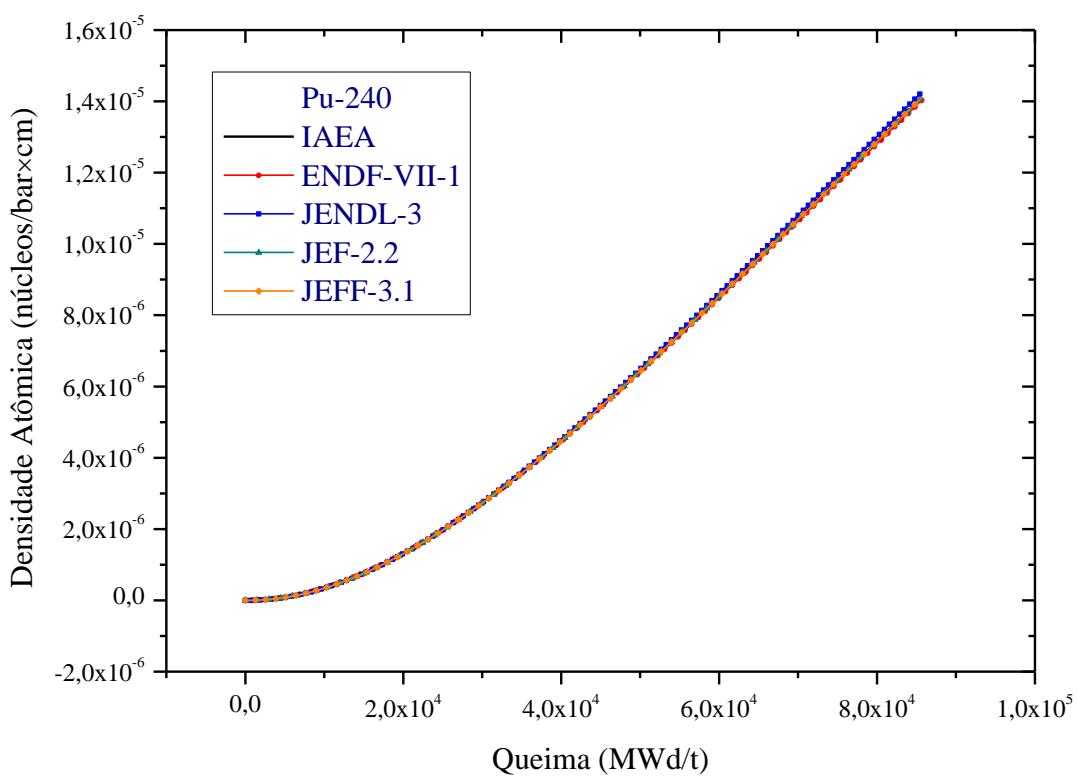


Figura 30: Variação de densidade atômica do ^{240}Pu em função da queima.

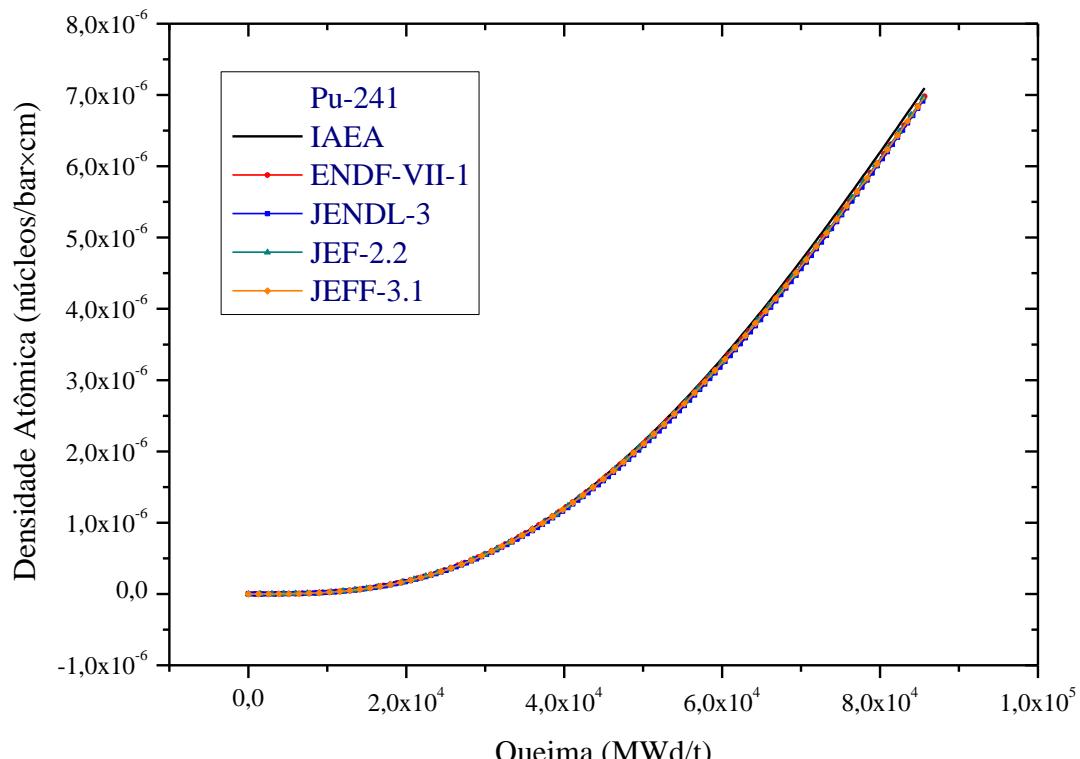


Figura 31: Variação de densidade atômica do ^{241}Pu em função da queima.

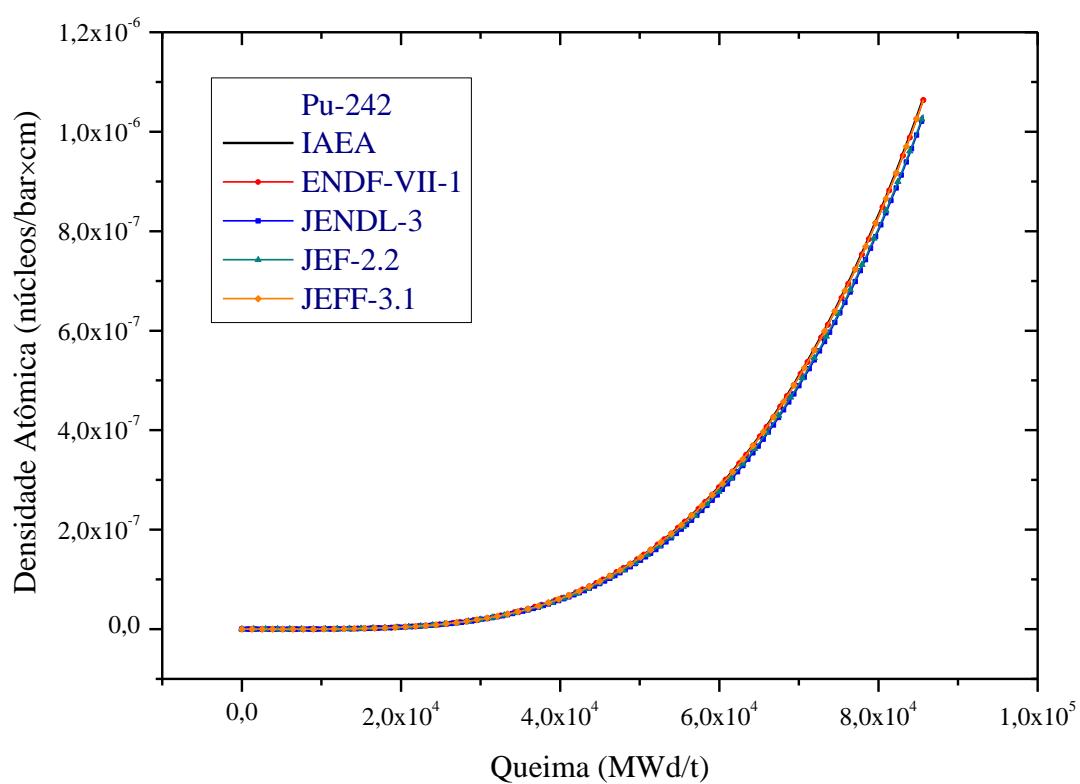


Figura 32: Variação de densidade atômica do ^{242}Pu em função da queima.

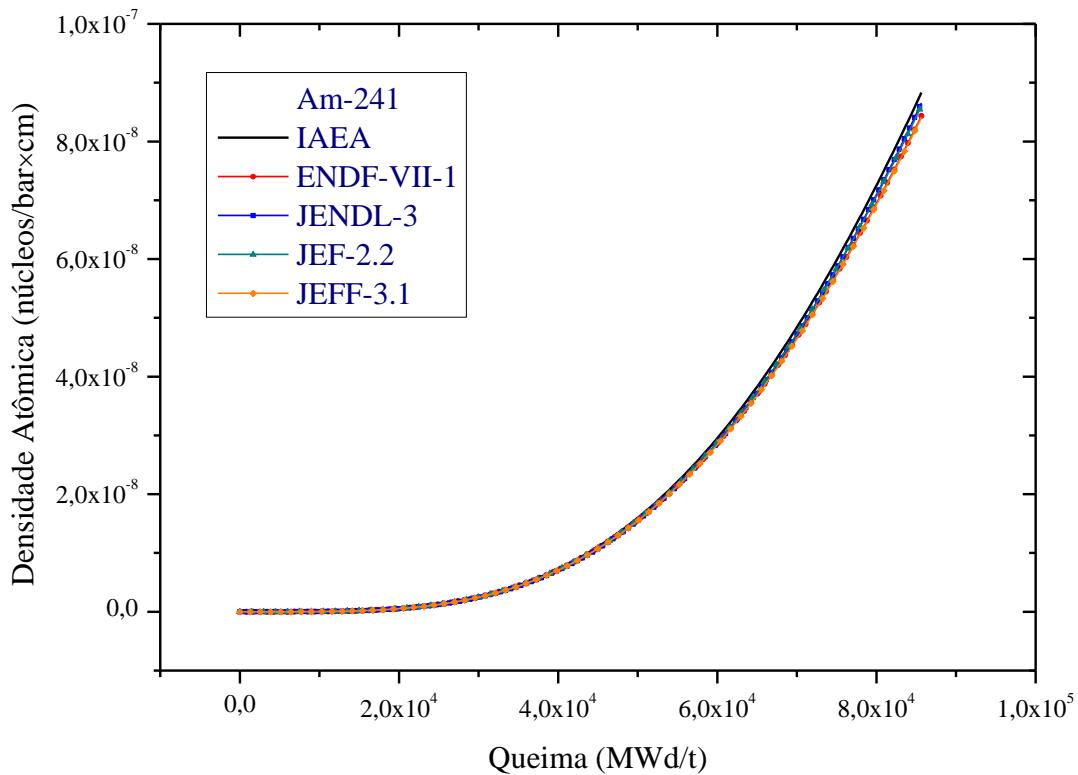


Figura 33: Variação de densidade atômica do ^{241}Am em função da queima.

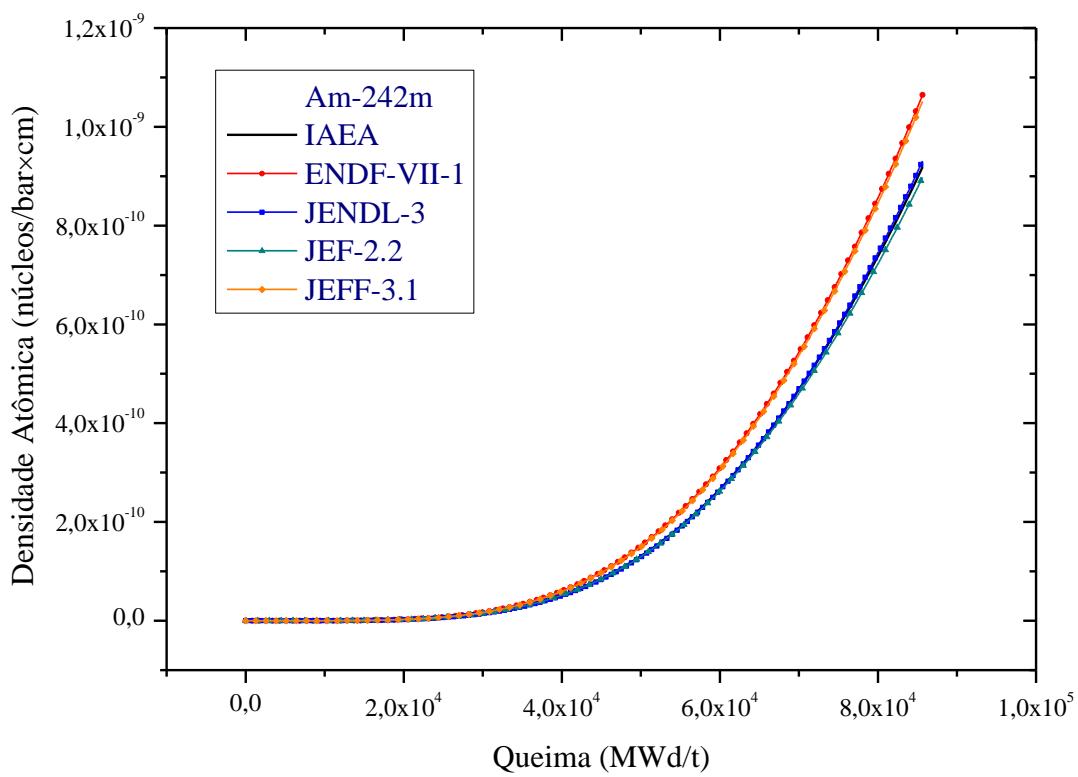


Figura 34: Variação de densidade atômica do $^{242\text{m}}\text{Am}$ em função da queima.

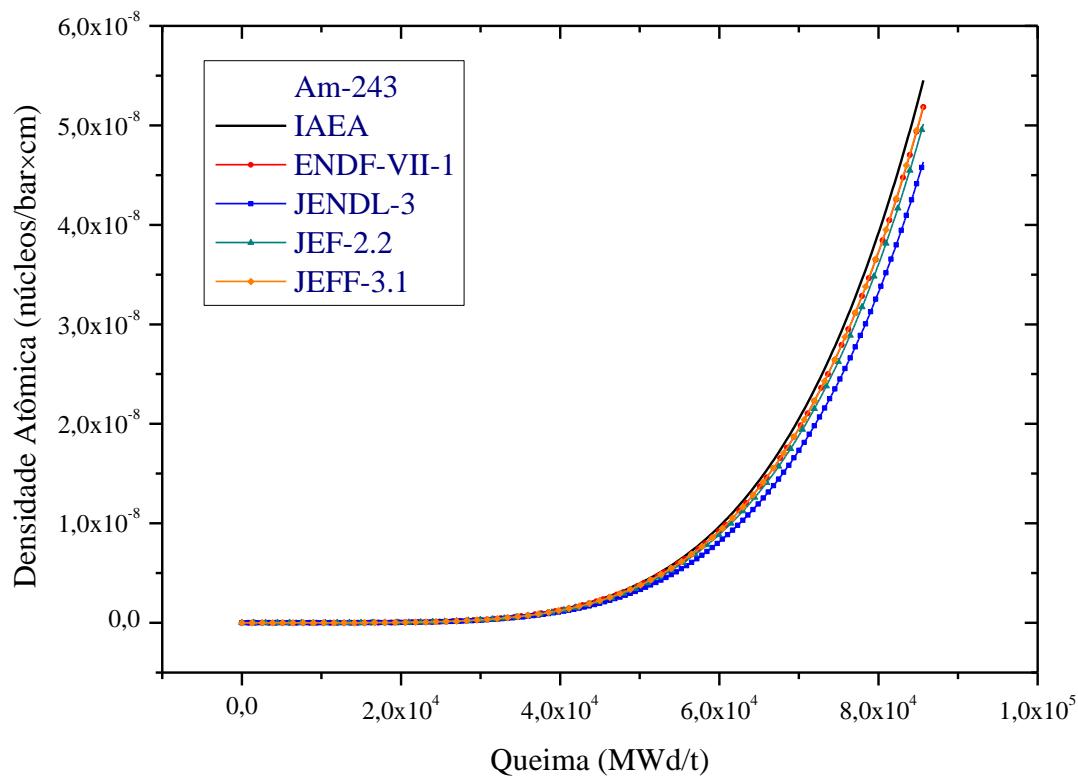


Figura 35: Variação de densidade atômica do ^{243}Am em função da queima.

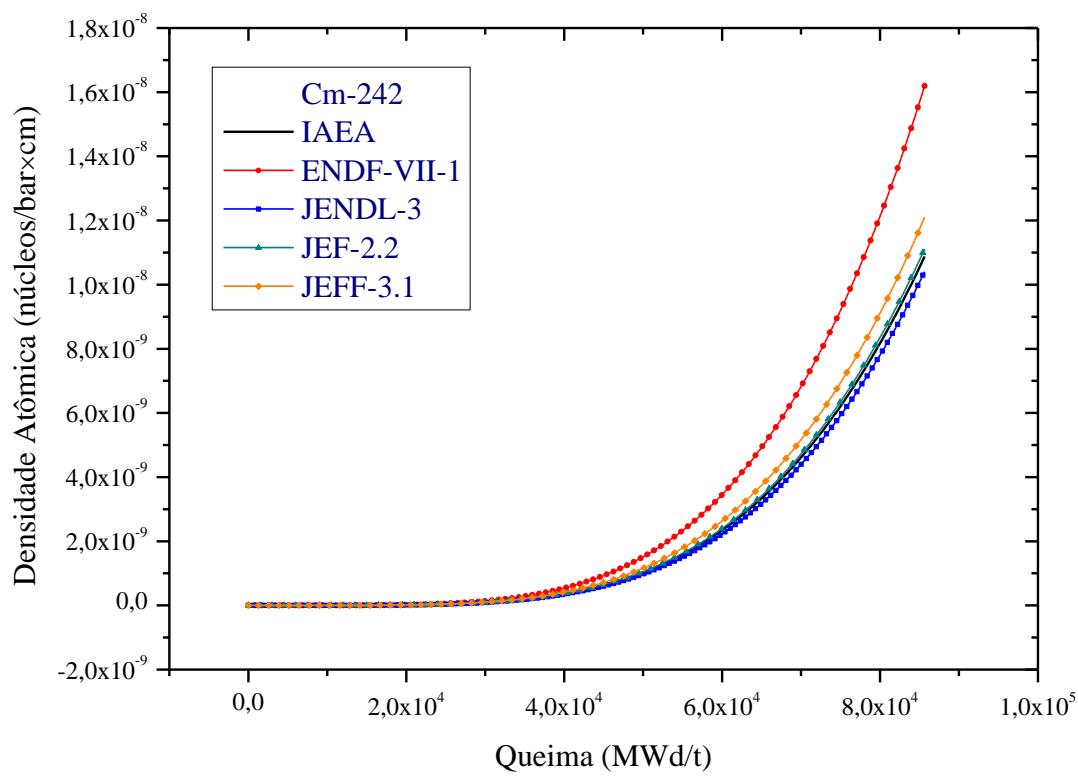
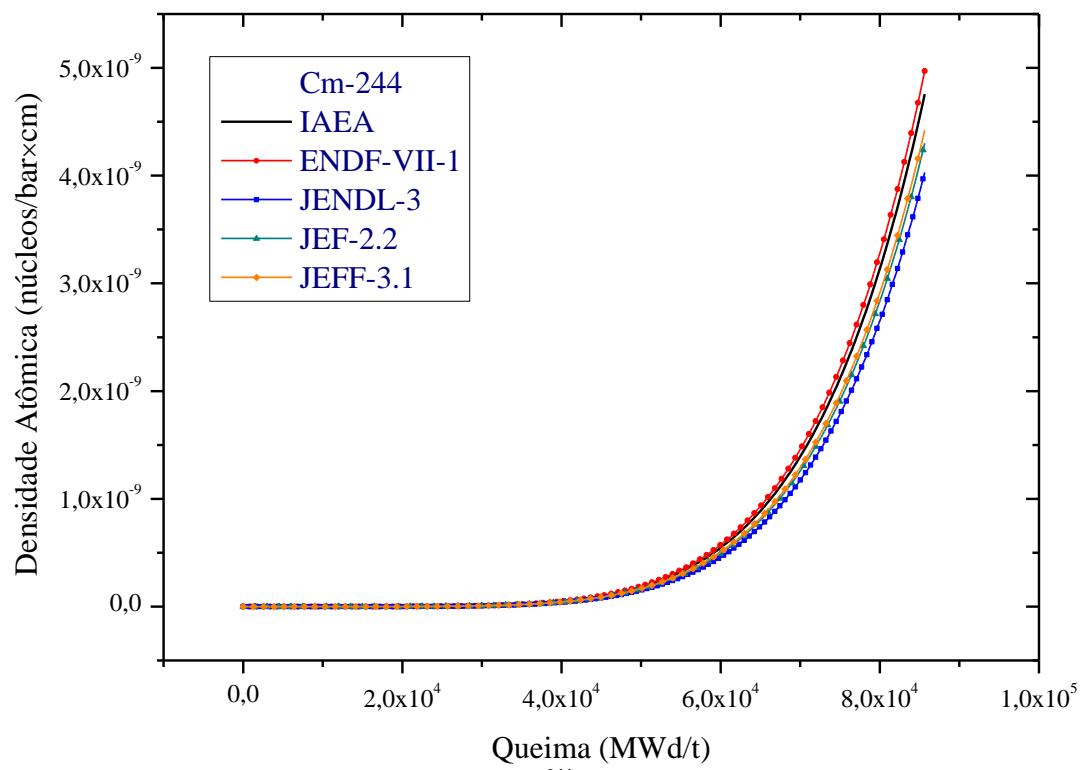
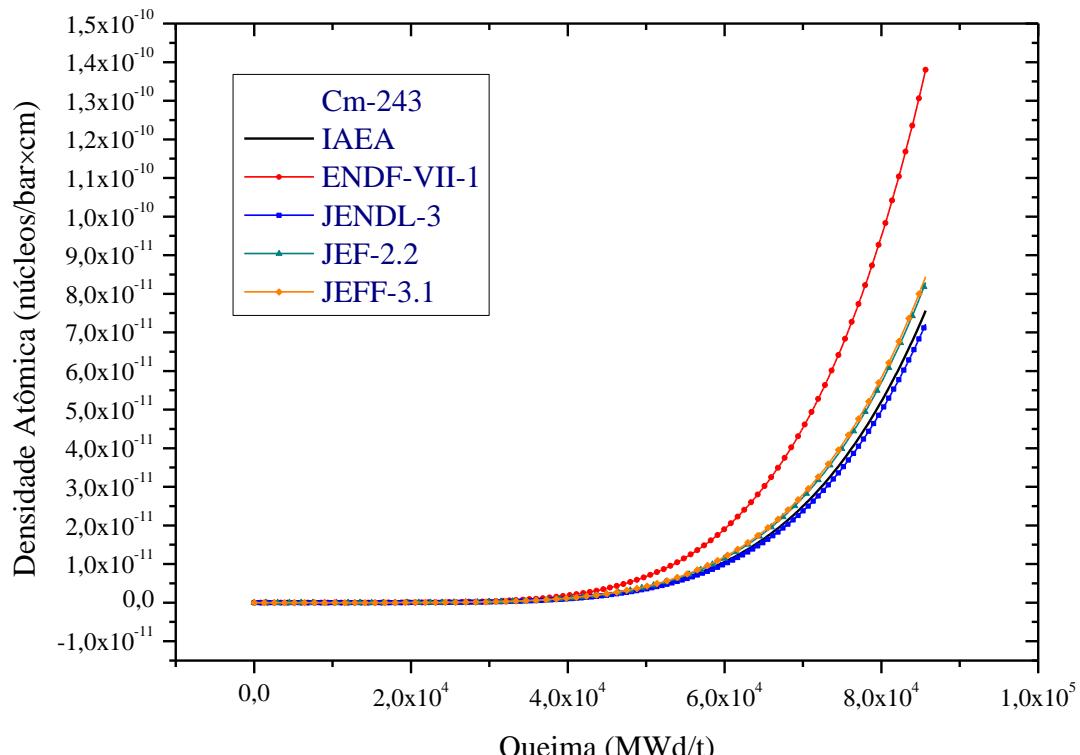


Figura 36: Variação de densidade atômica do ^{242}Cm em função da queima.



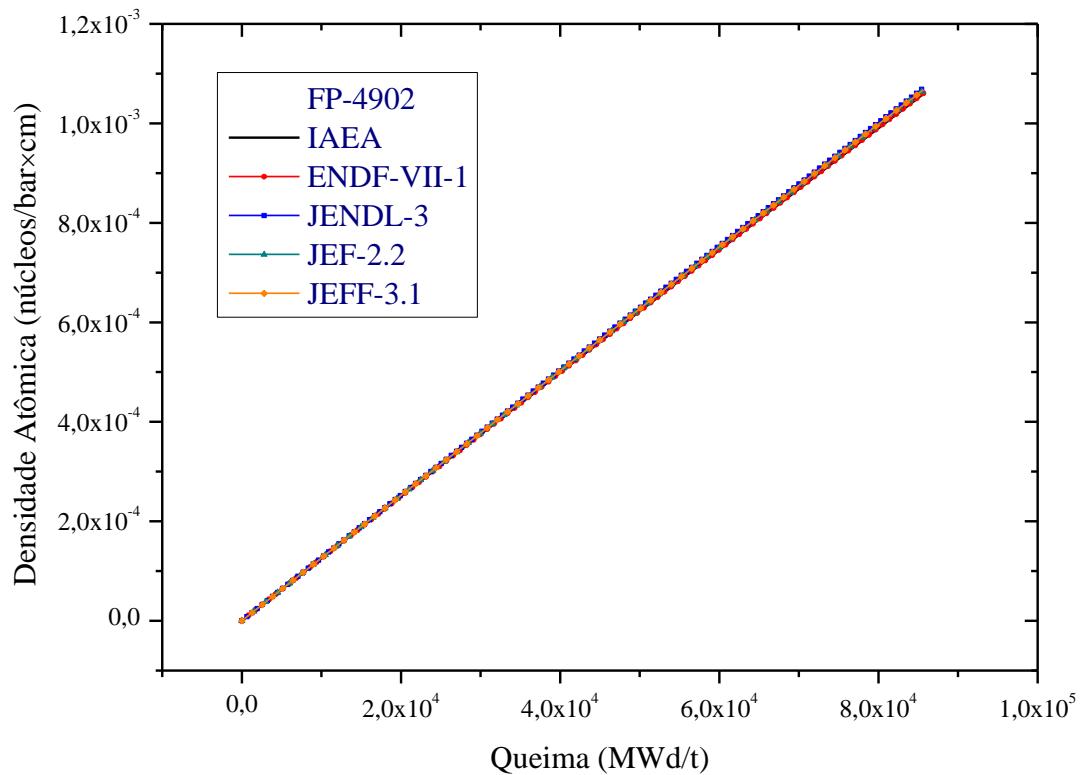


Figura 39: Variação de densidade atômica do ^{4902}FP em função da queima.

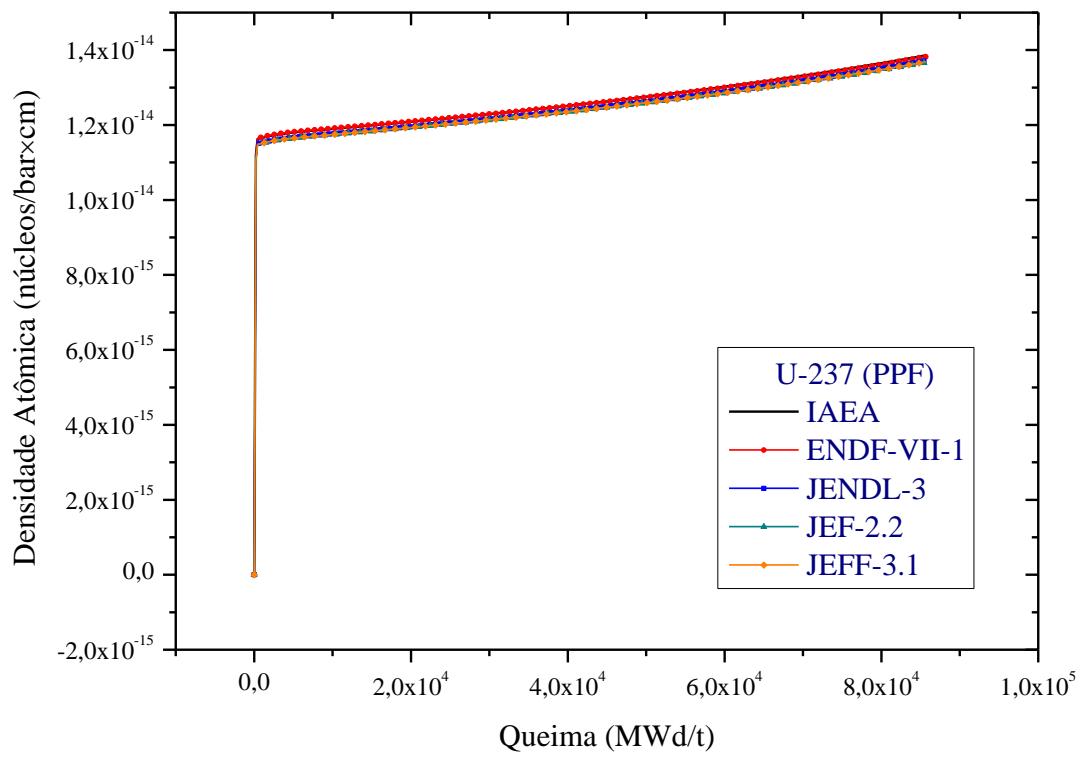


Figura 40: Variação de densidade atômica do ^{237}U (PPF) em função da queima.

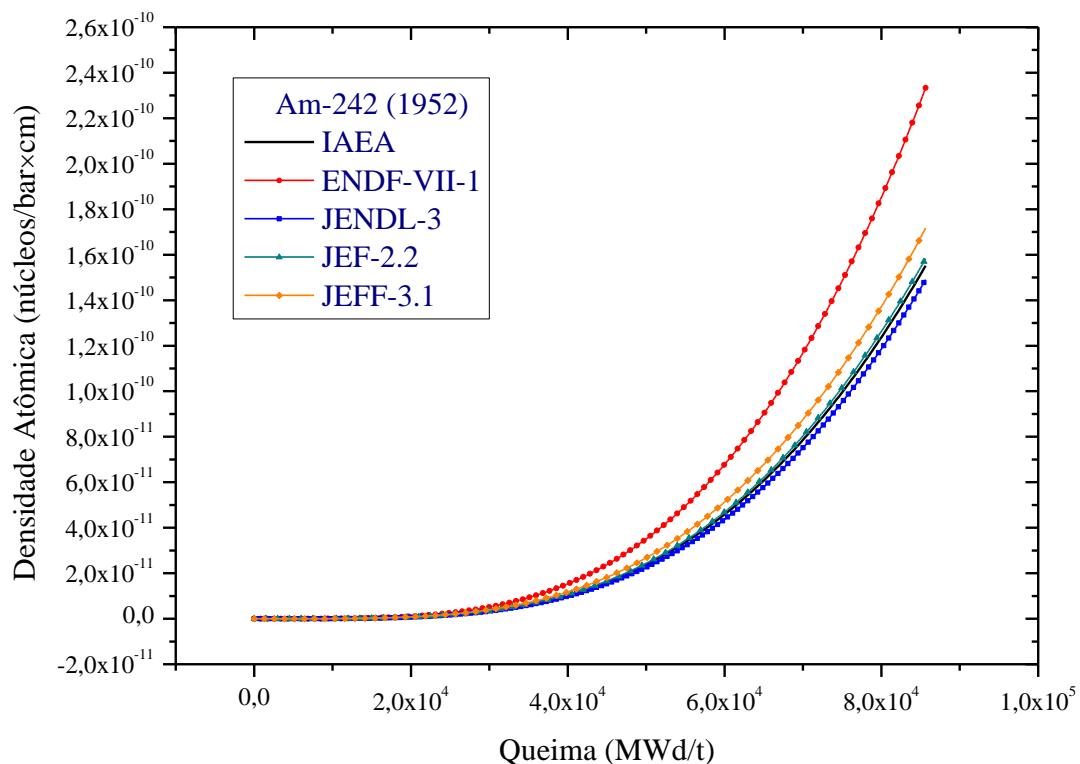


Figura 41: Variação de densidade atômica do ^{242}Am (1952) em função da queima.

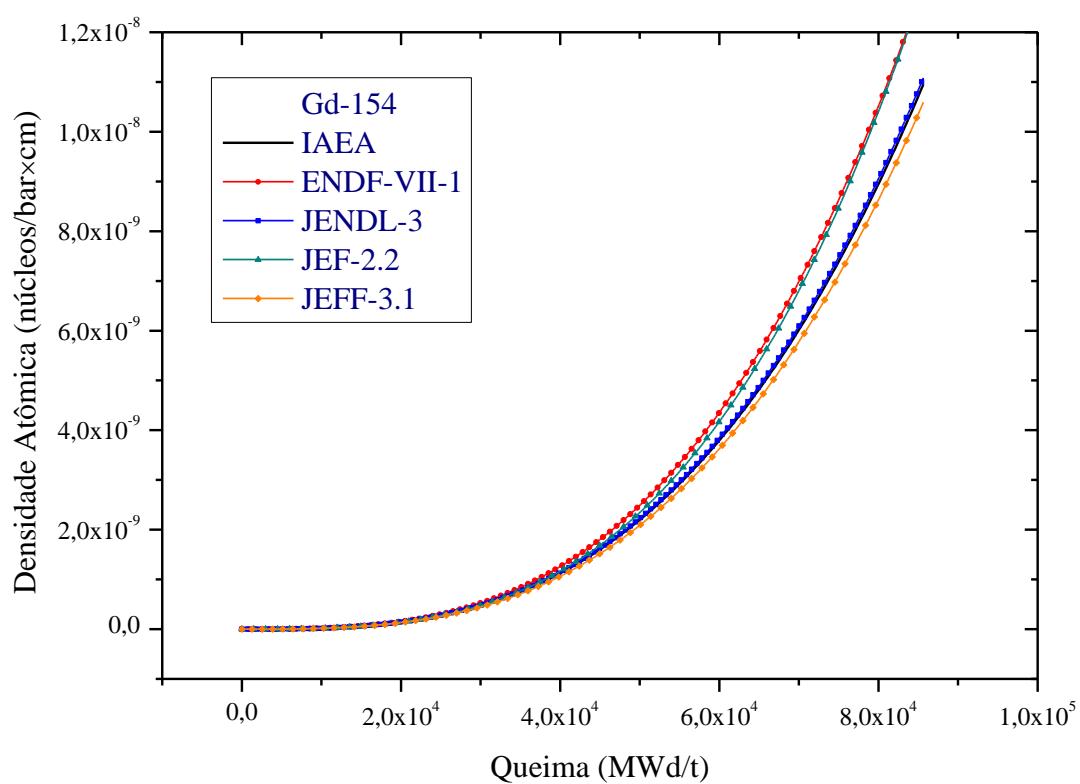


Figura 42: Variação de densidade atômica do ^{154}Gd em função da queima.

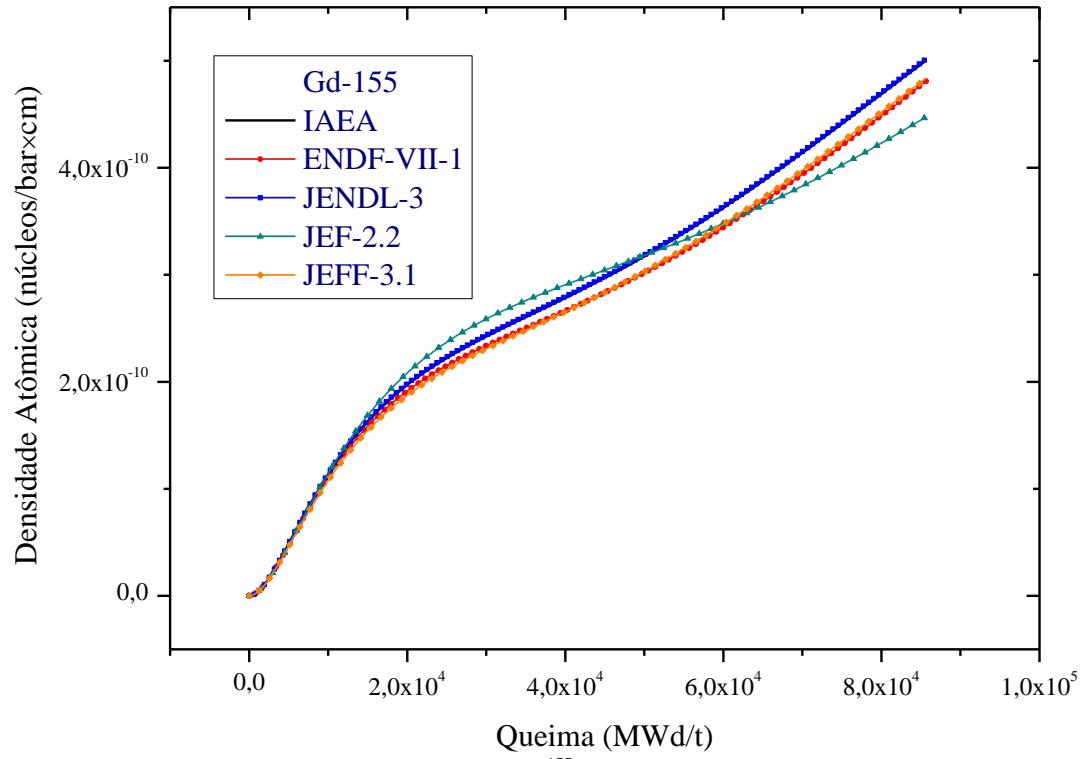


Figura 43: Variação de densidade atômica do ^{155}Gd em função da queima.

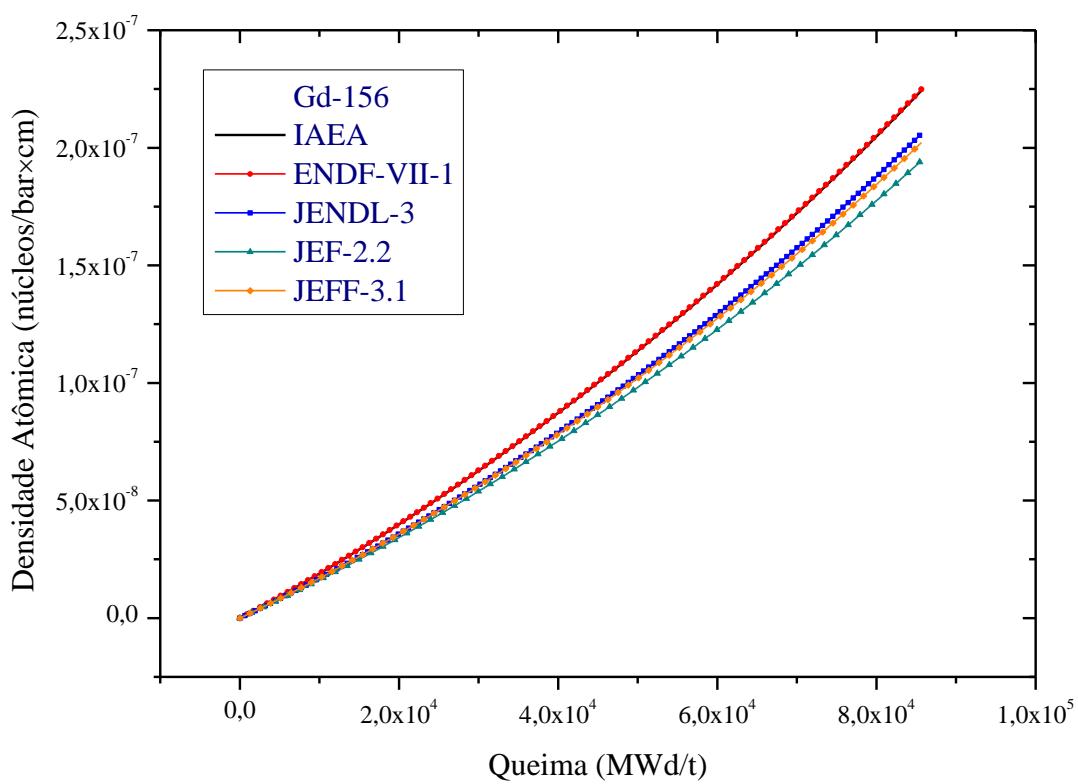


Figura 44: Variação de densidade atômica do ^{156}Gd em função da queima.

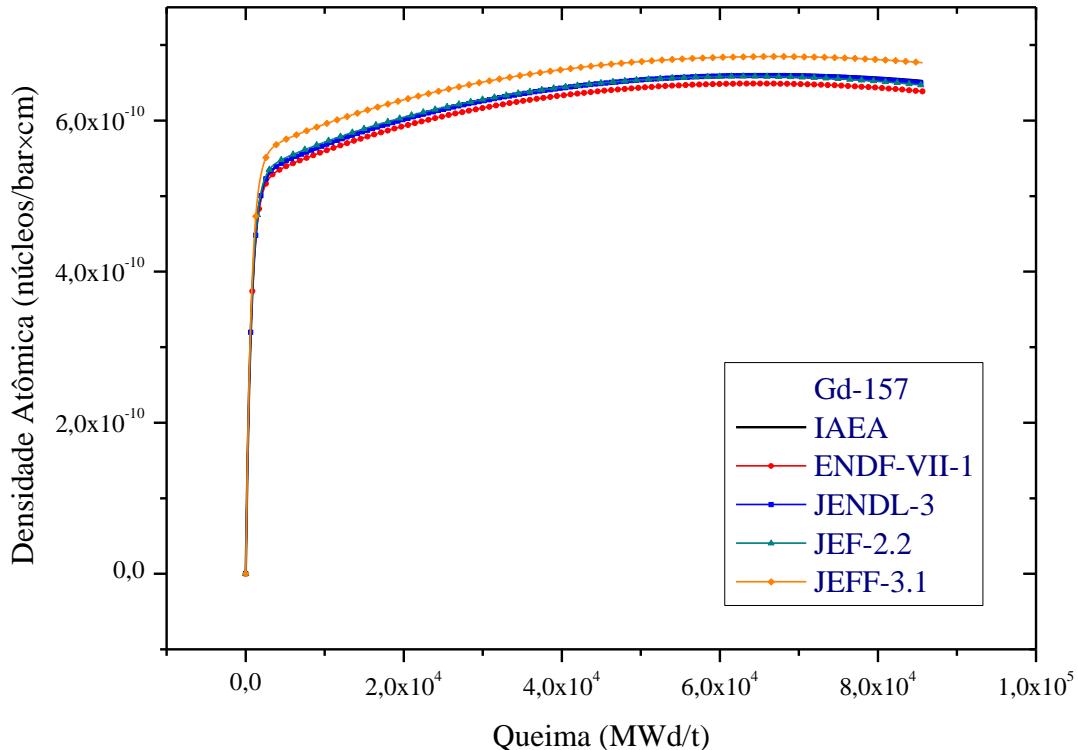


Figura 45: Variação de densidade atômica do ^{157}Gd em função da queima.

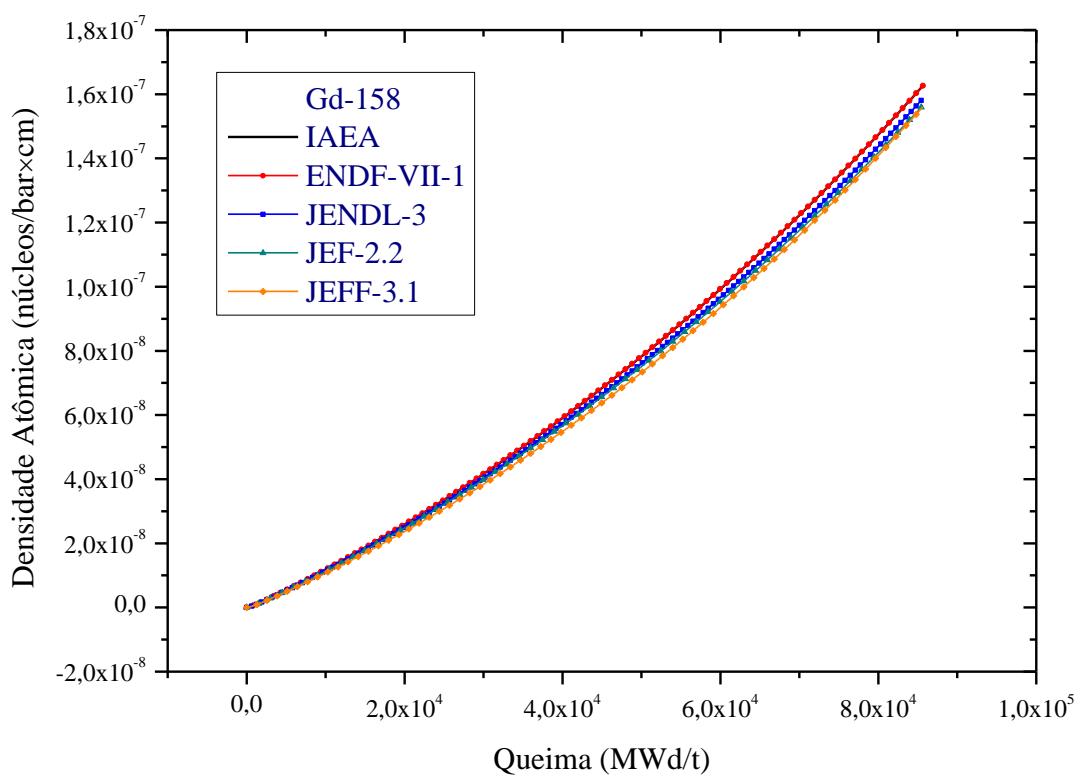


Figura 46: Variação de densidade atômica do ^{158}Gd em função da queima.

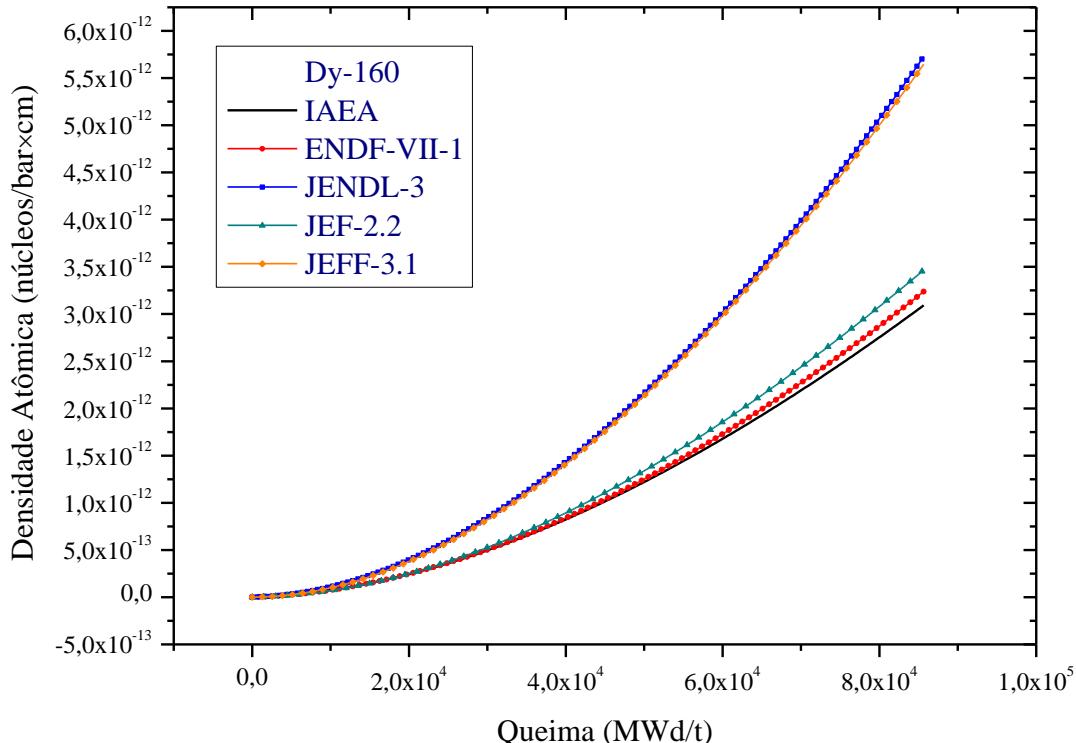


Figura 47: Variação de densidade atômica do ^{160}Dy em função da queima.

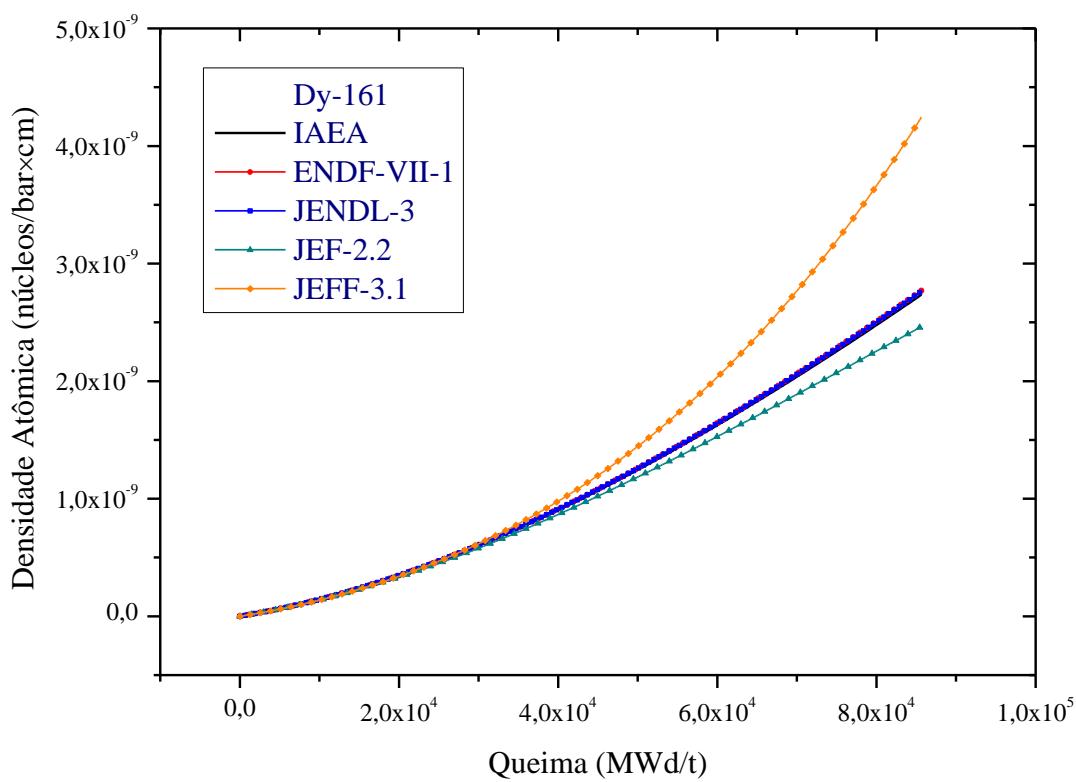


Figura 48: Variação de densidade atômica do ^{161}Dy em função da queima.

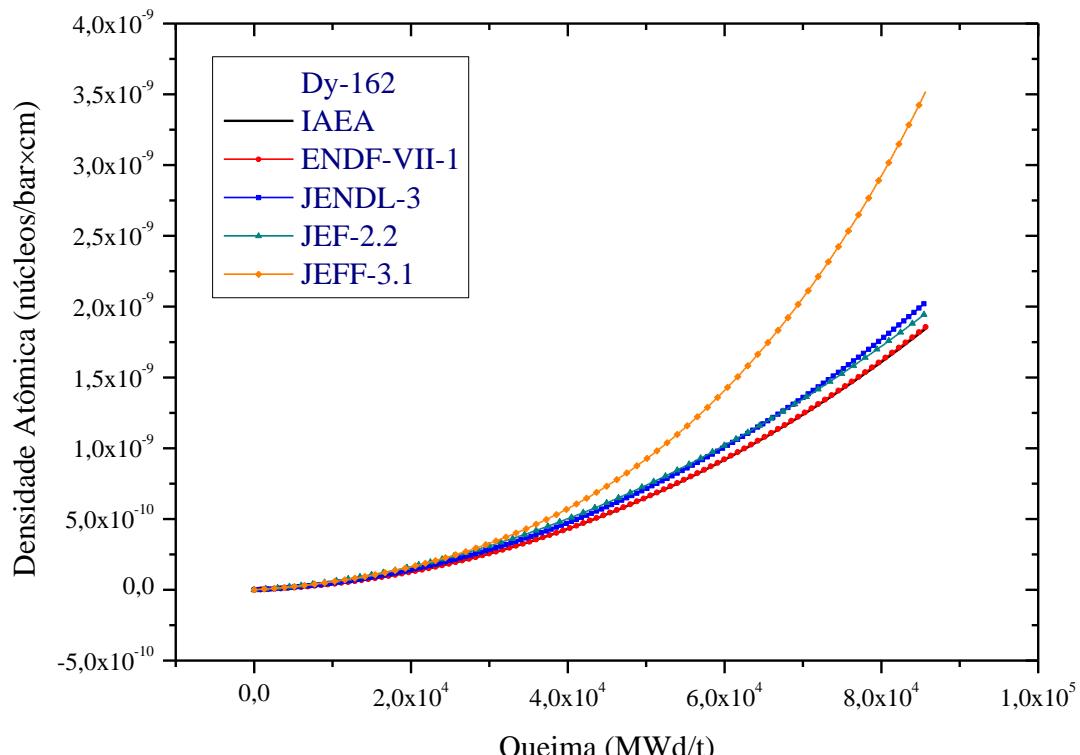


Figura 49: Variação de densidade atômica ^{162}Dy em função da queima.

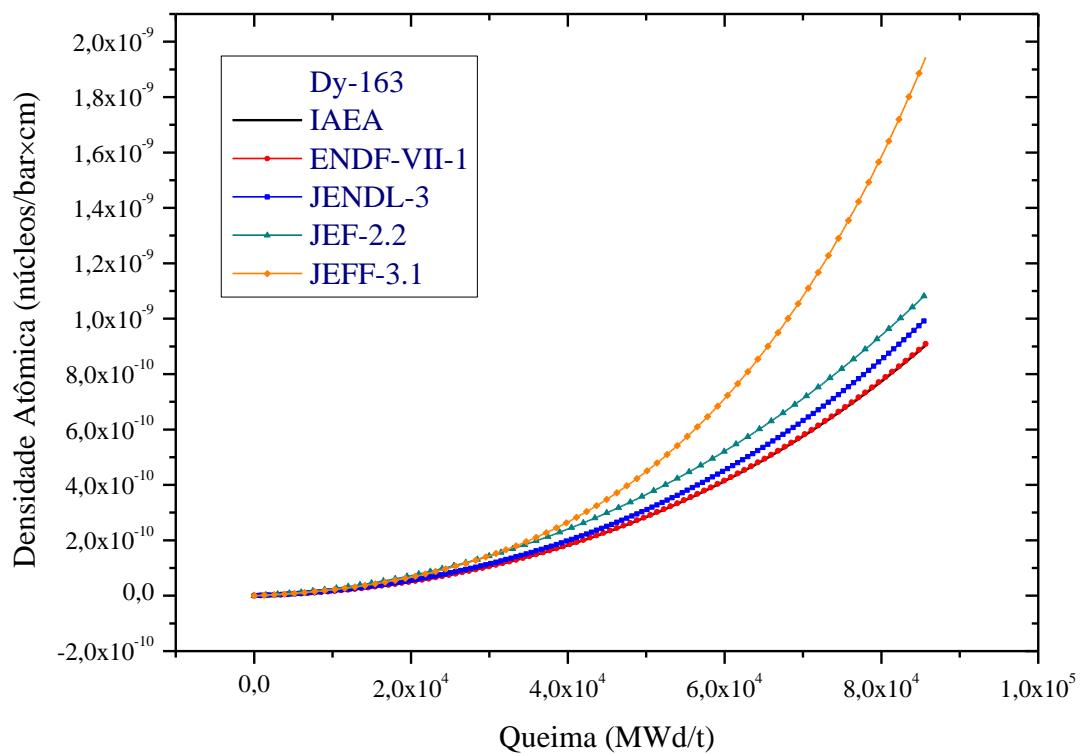


Figura 50: Variação de densidade atômica do ^{163}Dy em função da queima.

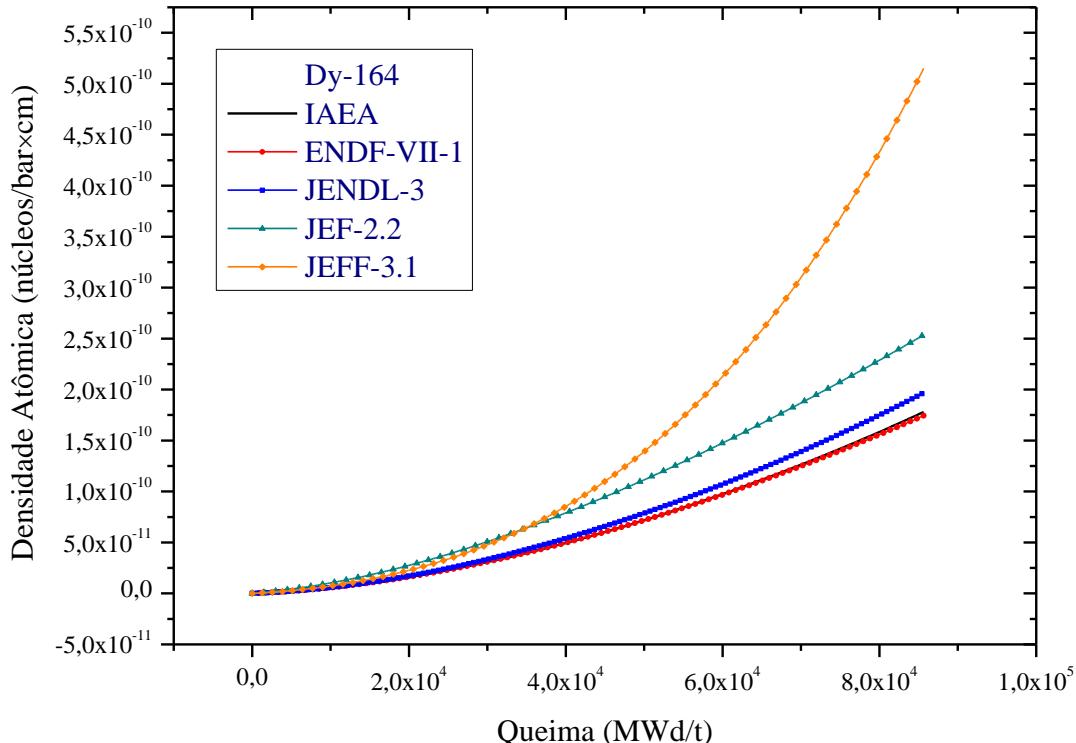


Figura 51: Variação de densidade atômica do ^{164}Dy em função da queima.

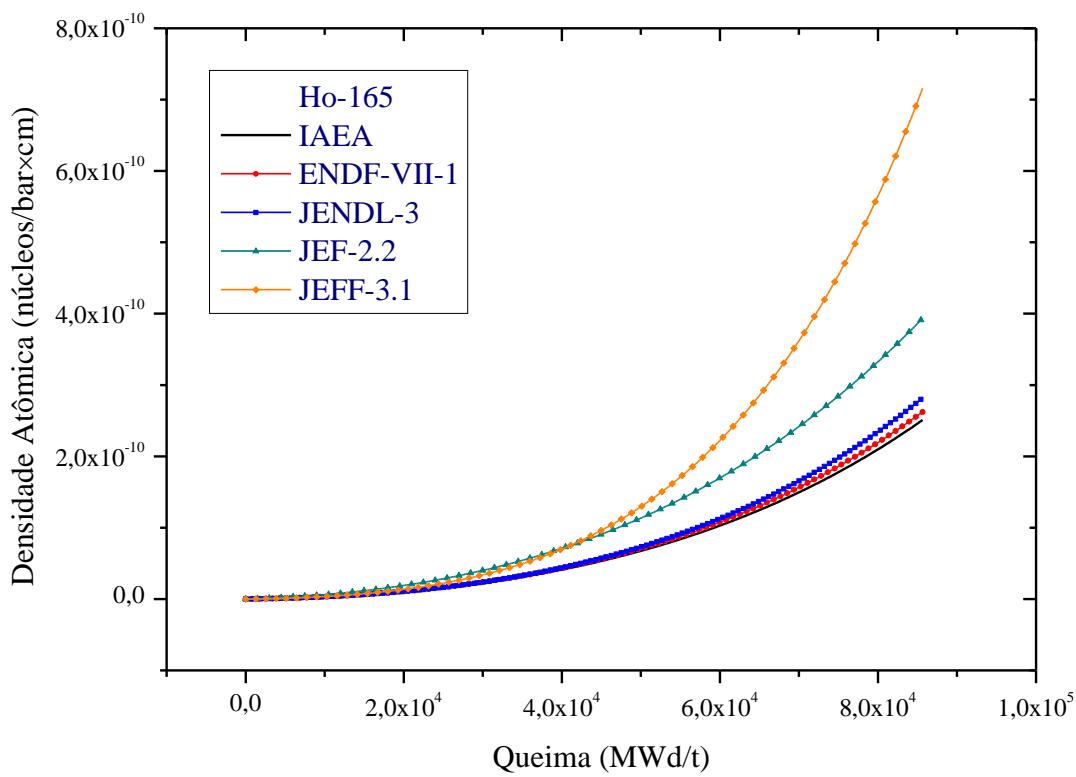


Figura 52: Variação de densidade atômica do ^{165}Ho em função da queima.

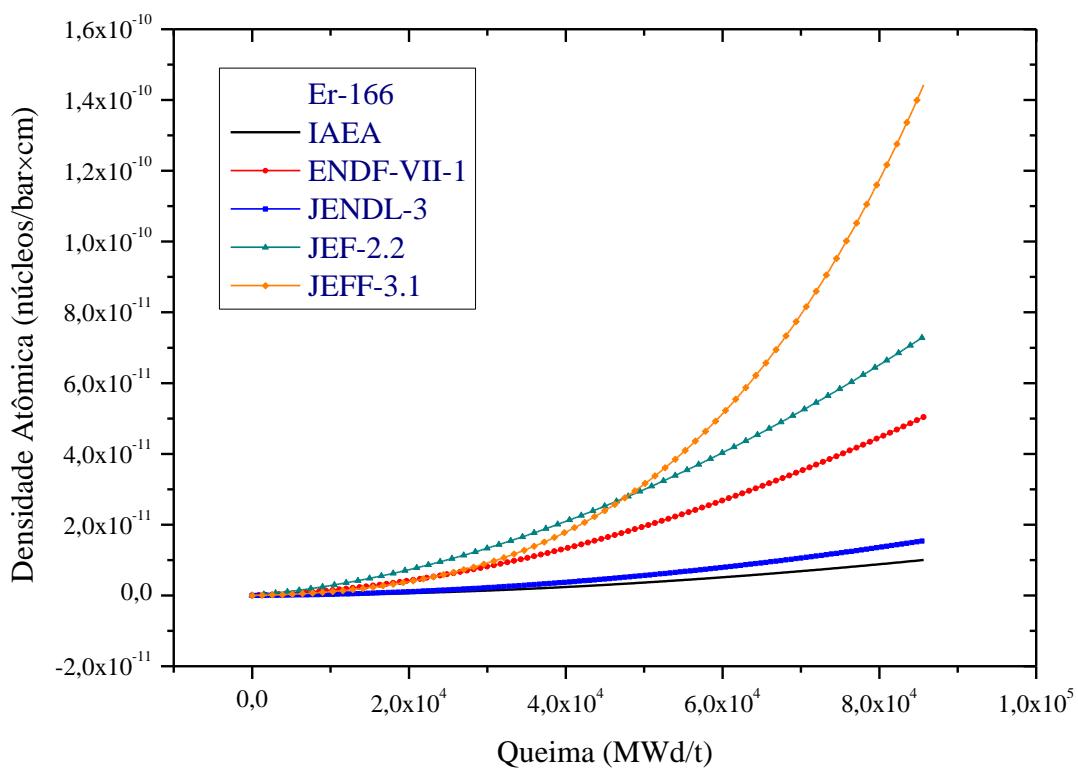


Figura 53: Variação de densidade atômica do ^{166}Er em função da queima.

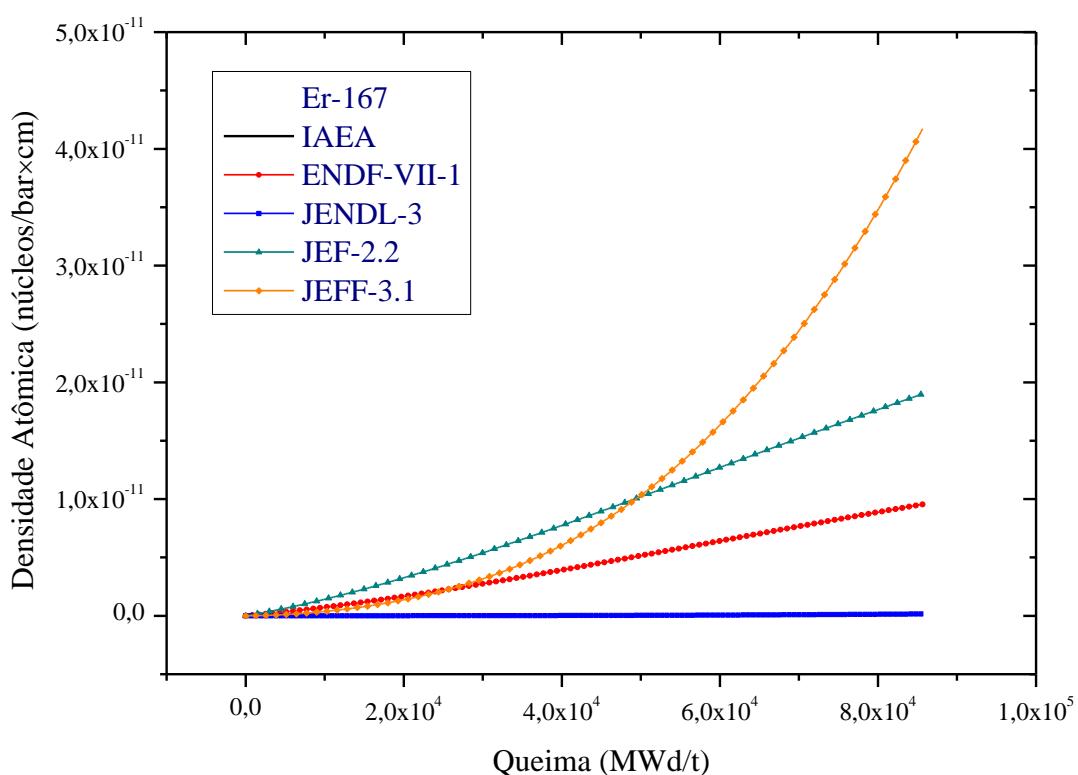


Figura 54: Variação de densidade atômica do ^{167}Er em função da queima.

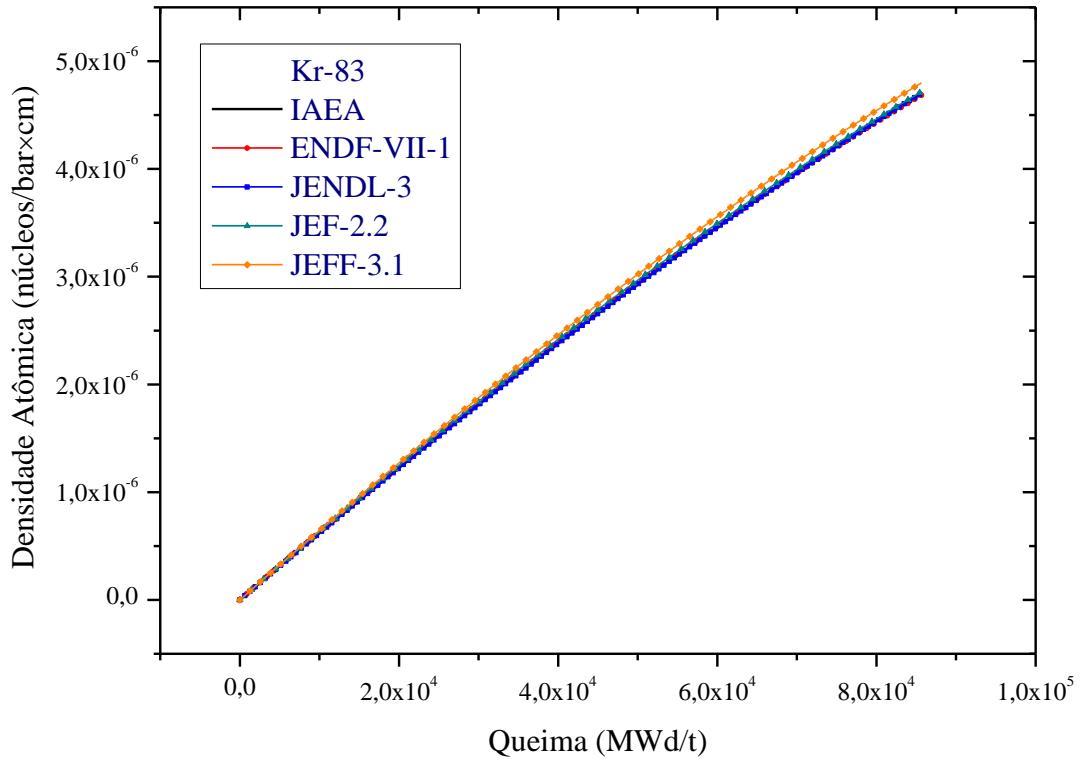


Figura 55: Variação de densidade atômica do ^{83}Kr em função da queima.

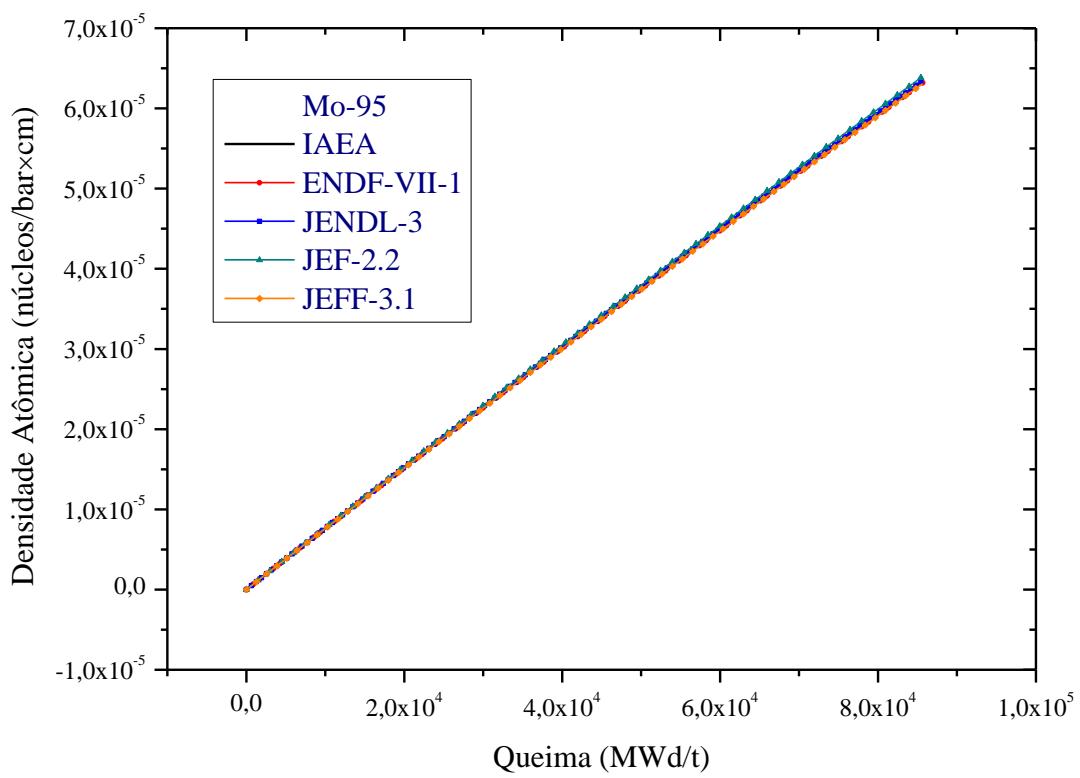


Figura 56: Variação de densidade atômica do ^{95}Mo em função da queima.

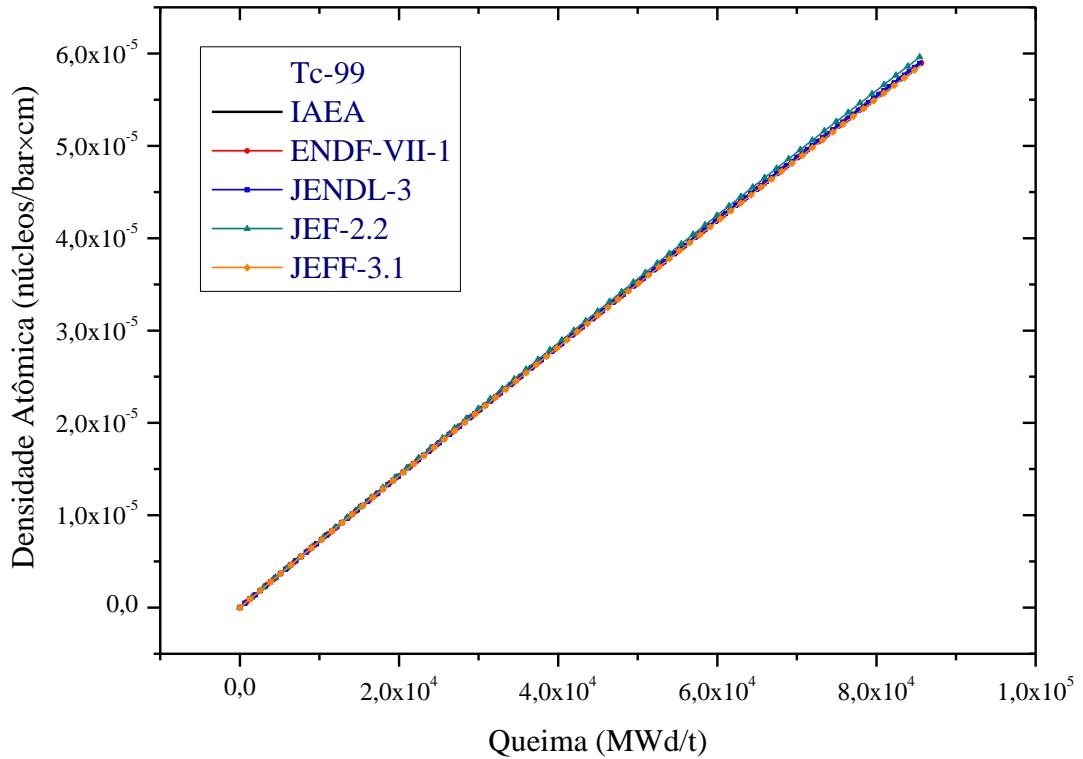


Figura 57: Variação de densidade atômica do ^{99}Tc em função da queima.

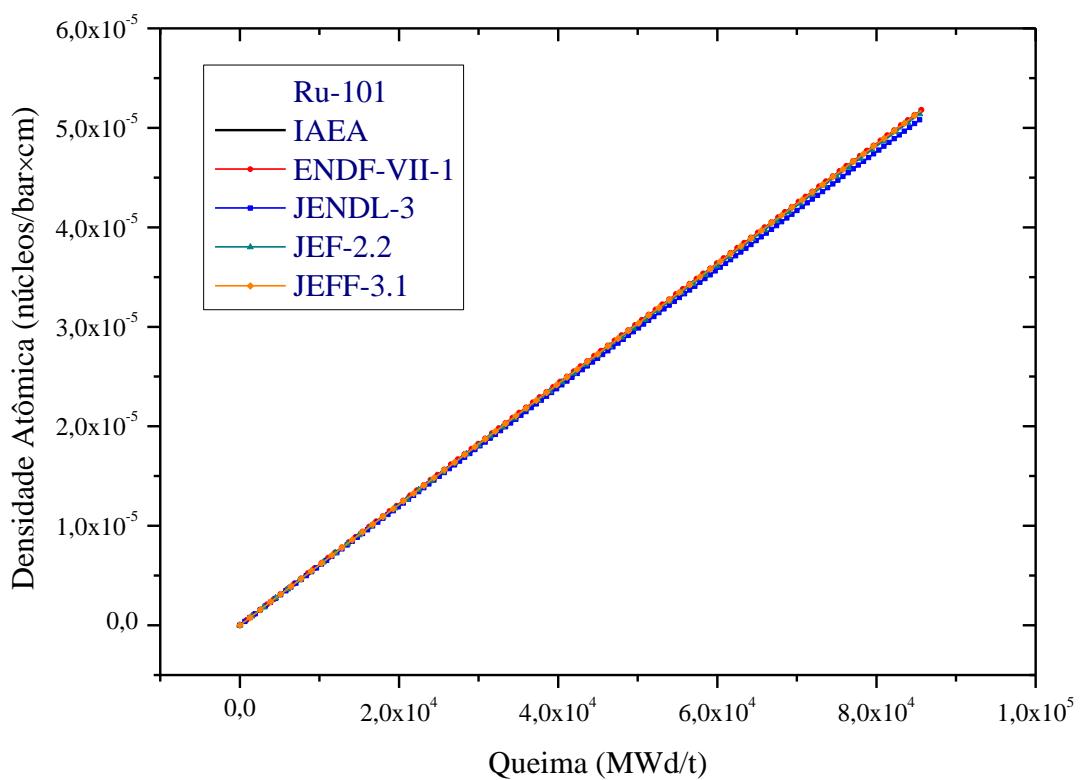


Figura 58: Variação de densidade atômica do ^{101}Ru em função da queima.

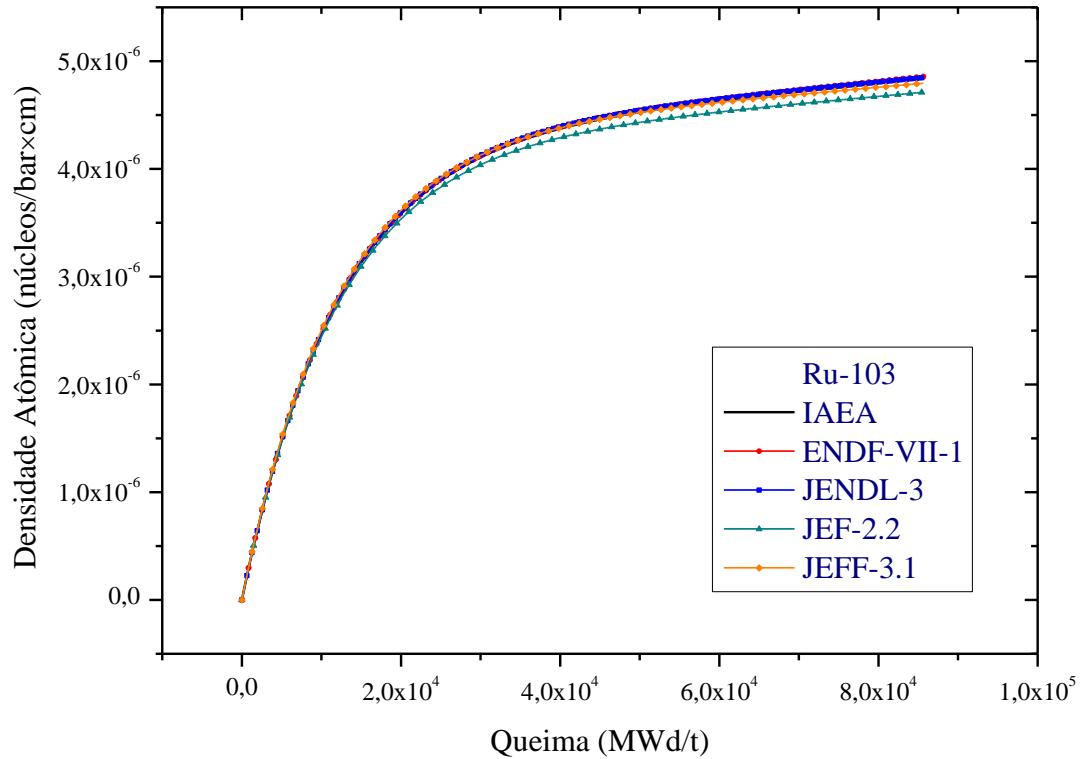


Figura 59: Variação de densidade atômica do ^{103}Ru em função da queima.

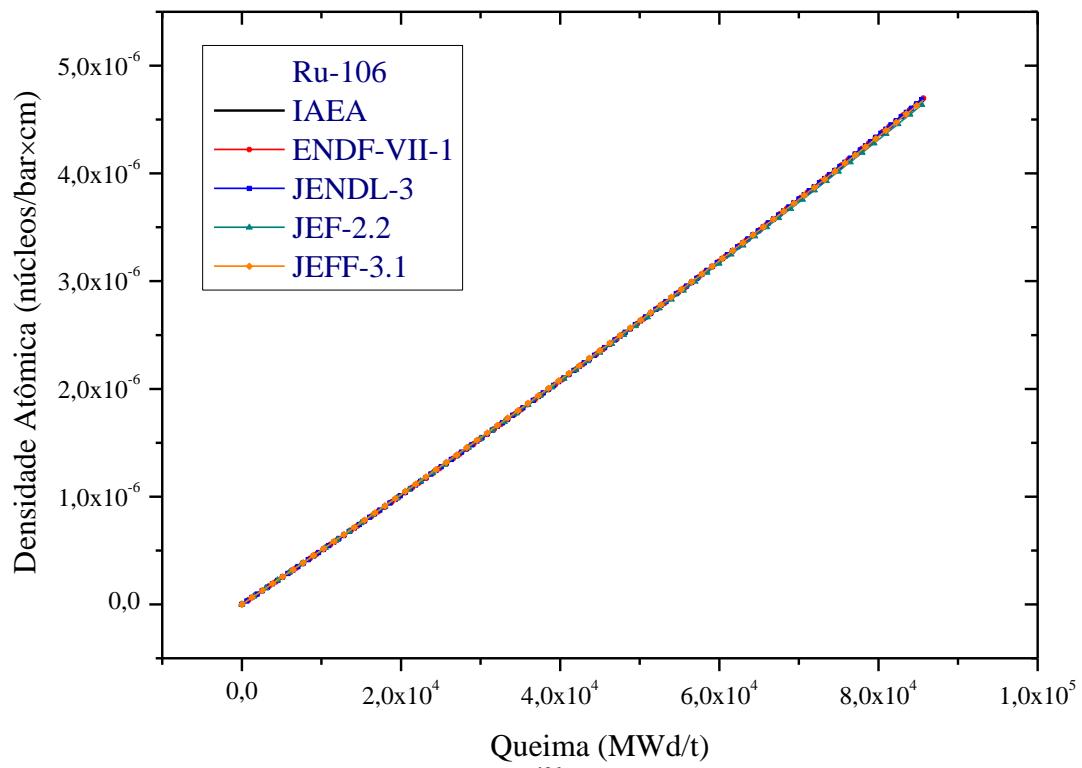


Figura 60: Variação de densidade atômica do ^{106}Ru em função da queima.

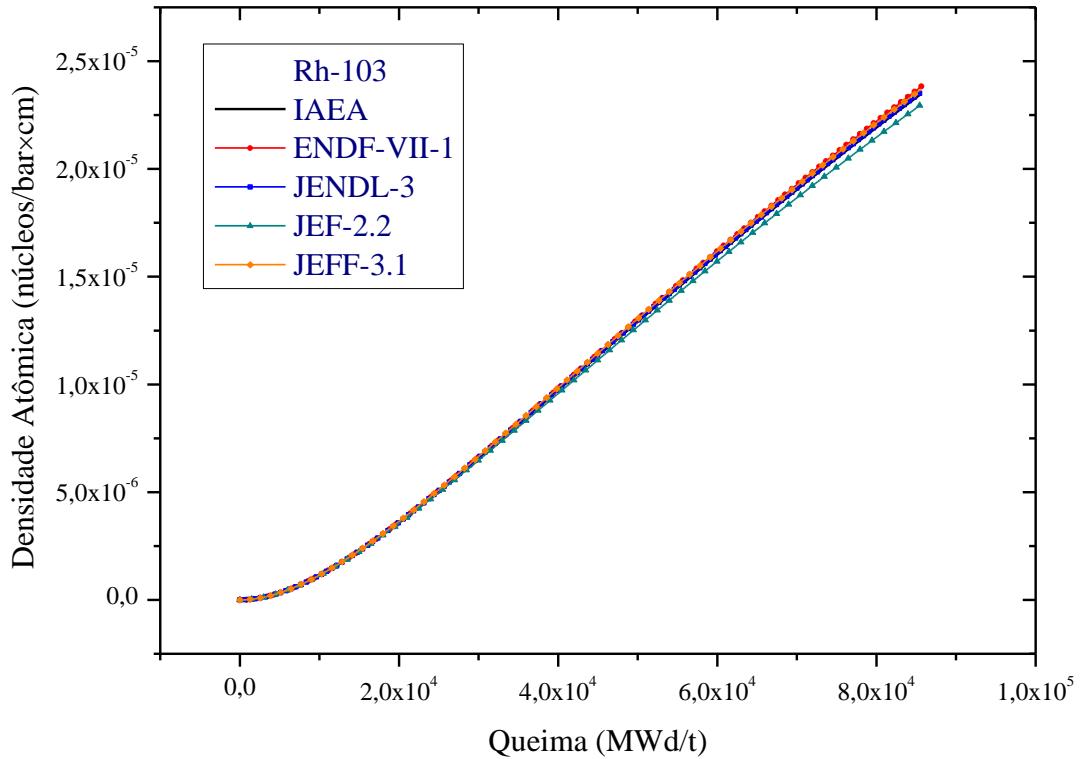


Figura 61: Variação de densidade atômica do ^{103}Rh em função da queima.

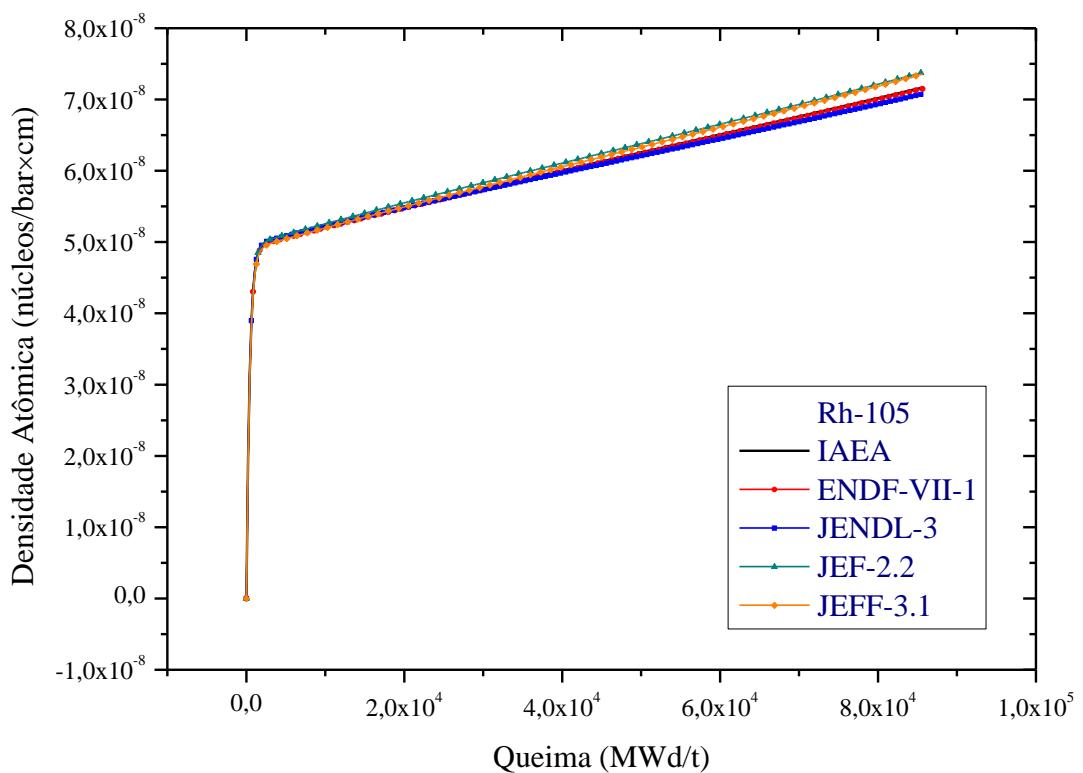


Figura 62: Variação de densidade atômica do ^{105}Rh em função a queima.

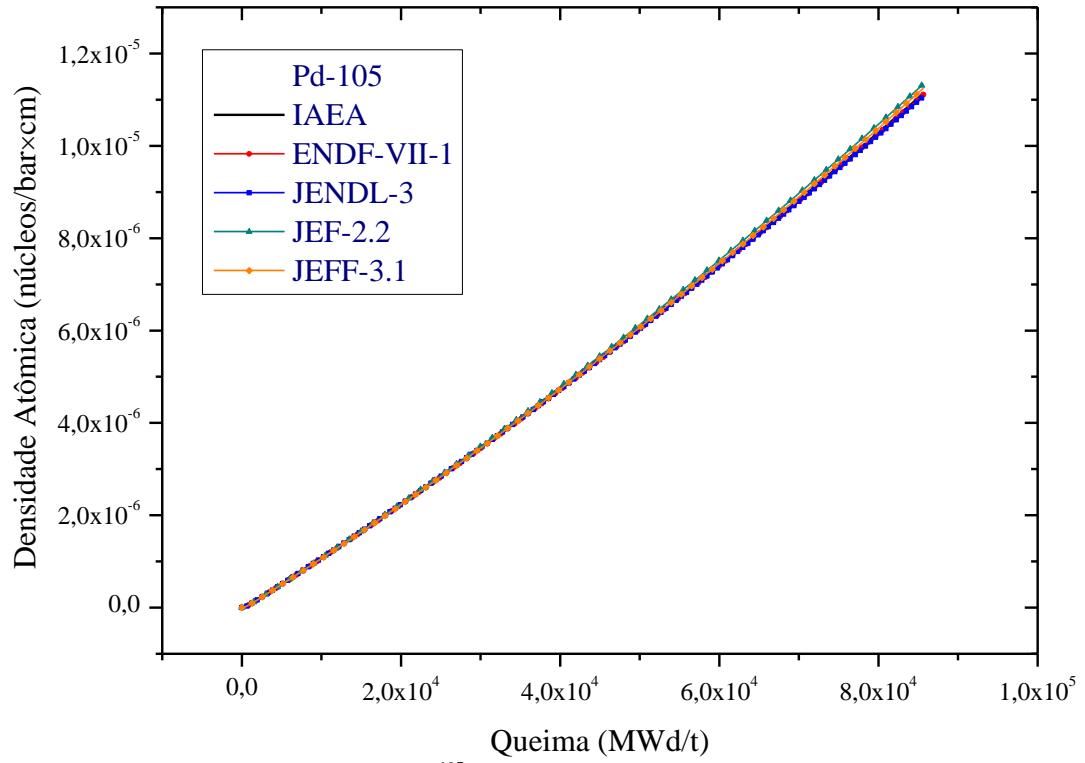


Figura 63: Variação de densidade do ^{105}Pd em função da queima.

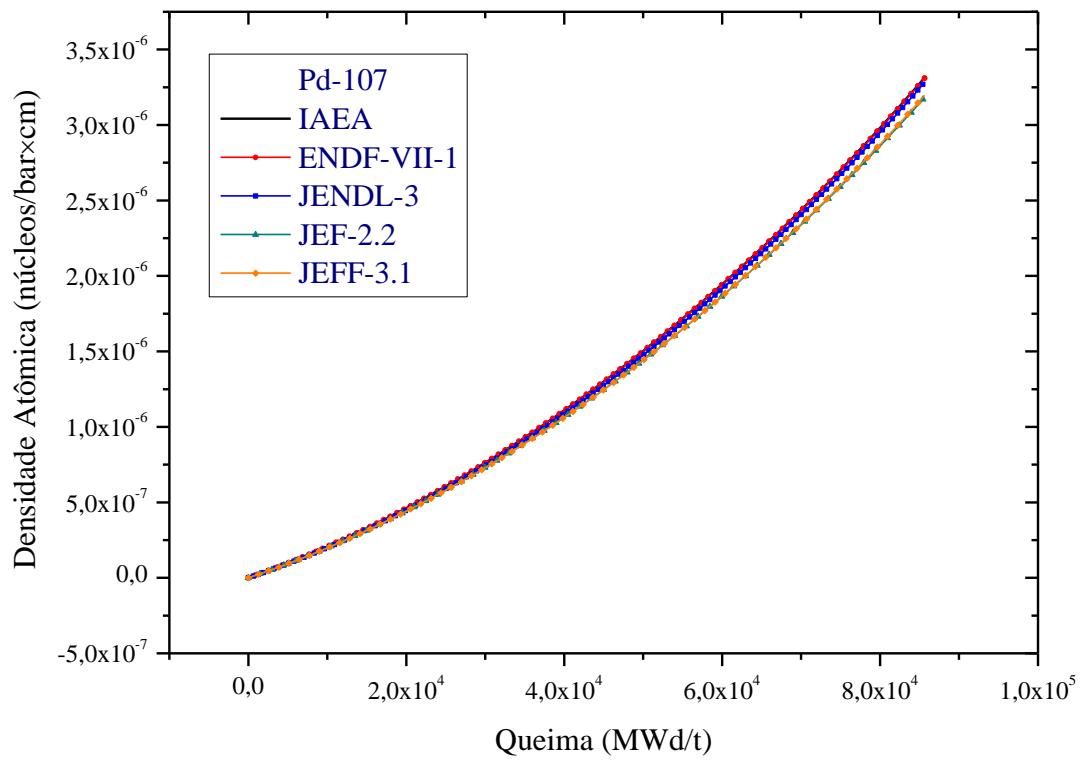


Figura 64: Variação de densidade atômica do ^{107}Pd em função da queima.

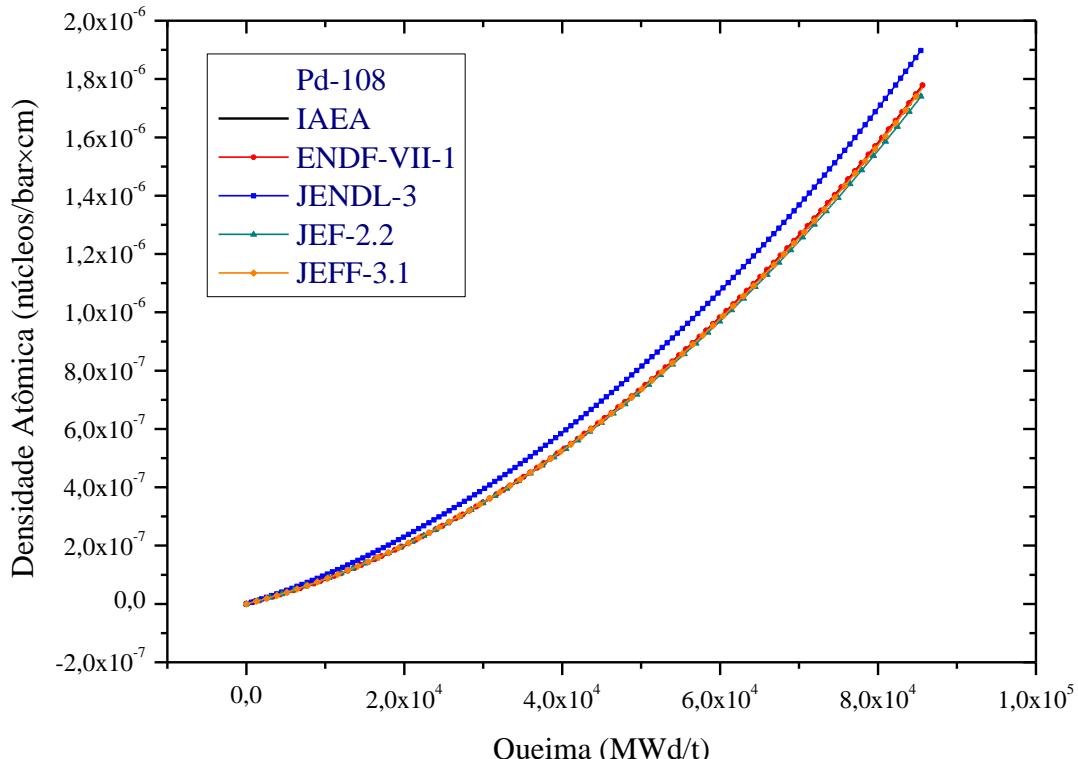


Figura 65: Variação de densidade atômica do ^{108}Pd em função da queima.

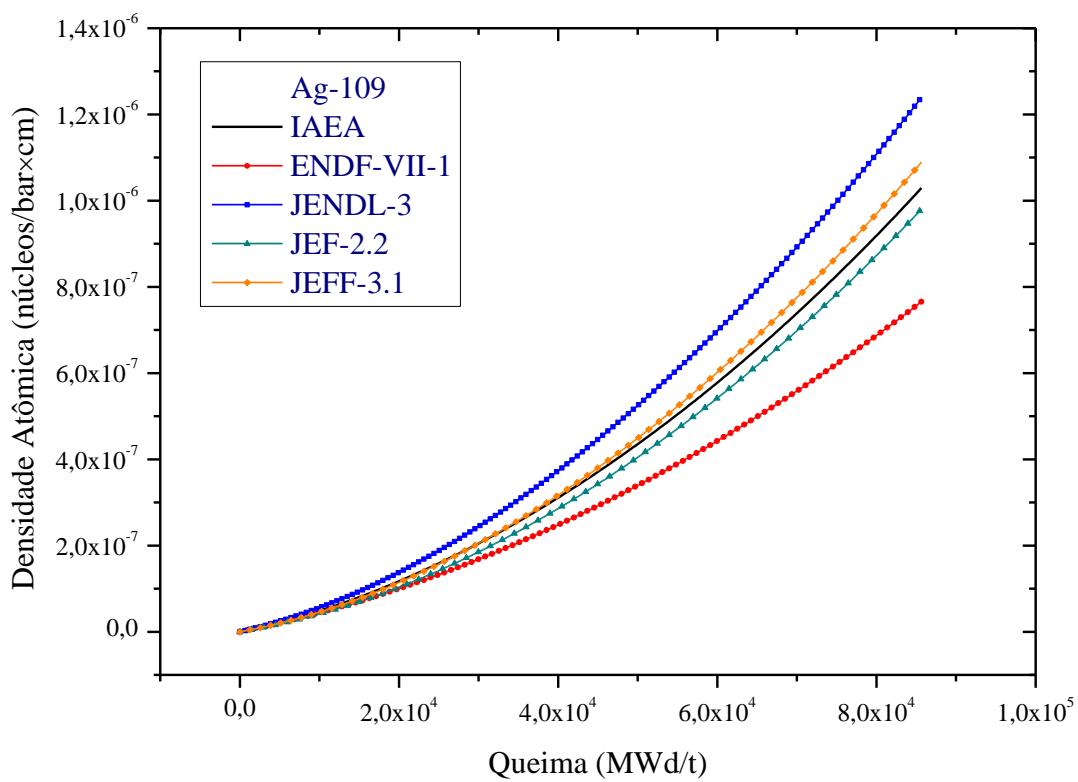


Figura 66: Variação de densidade atômica do ^{109}Ag em função da queima.

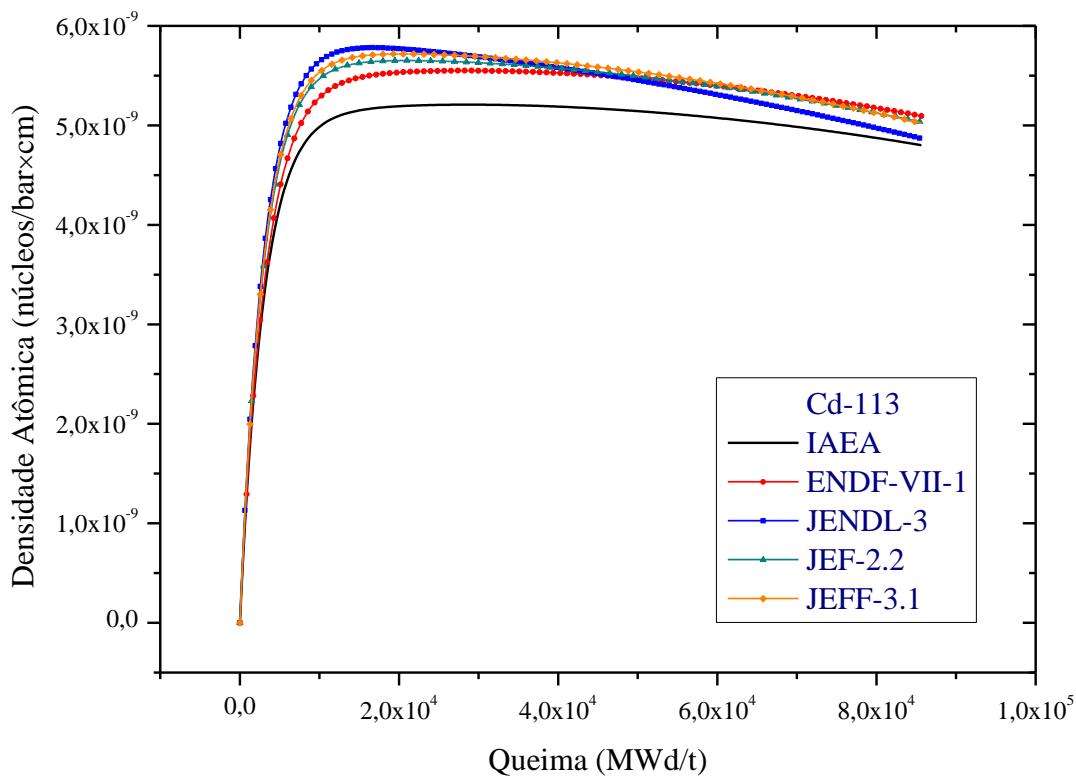


Figura 67: Variação de densidade atômica ^{113}Cd em função da queima.

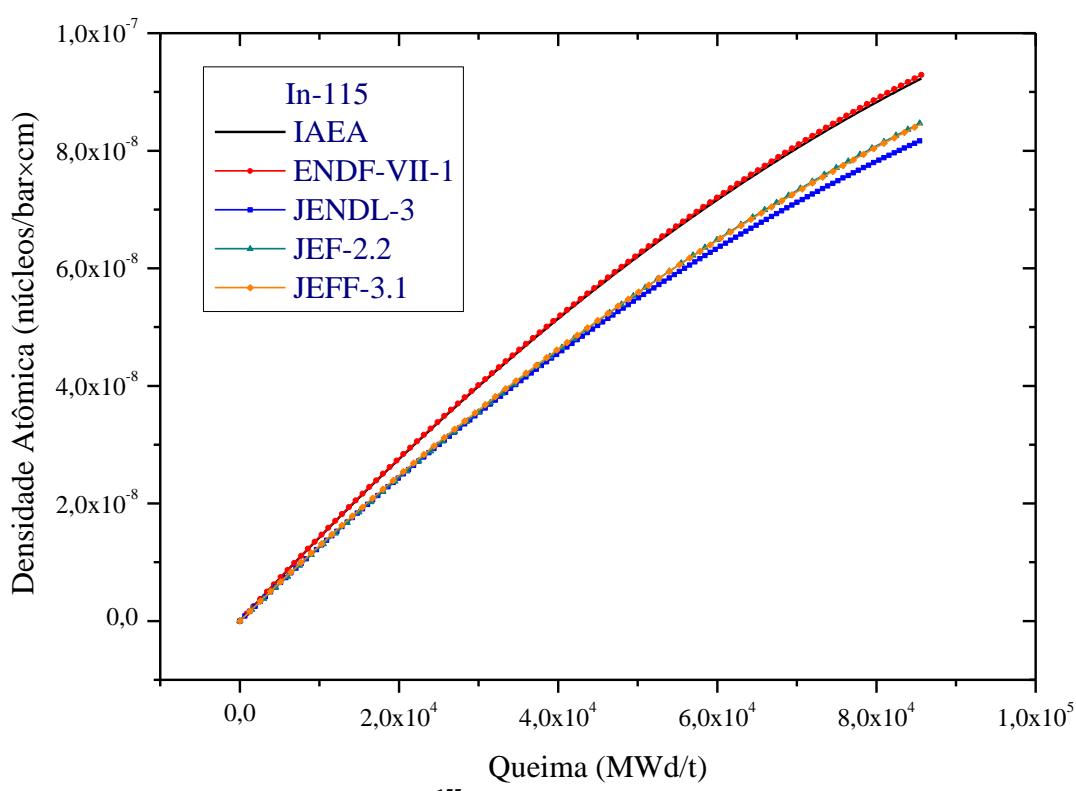


Figura 68: Variação de densidade do ^{155}In em função da queima.

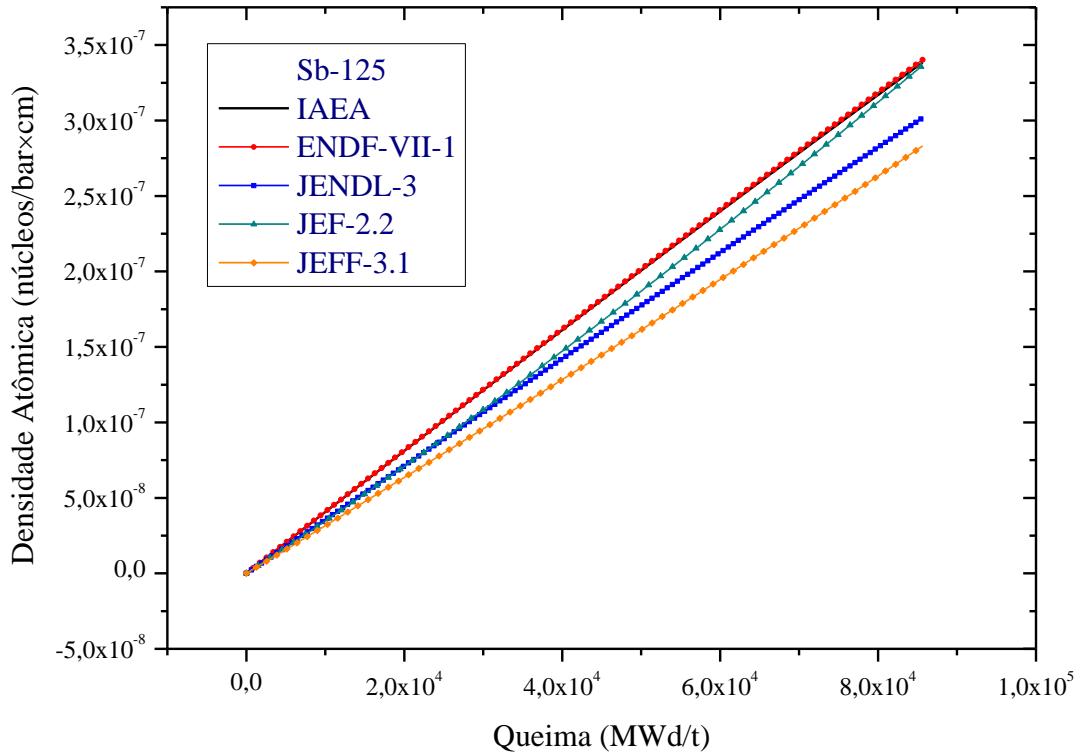


Figura 69: Variação de densidade atômica do ^{125}Sb em função da queima.

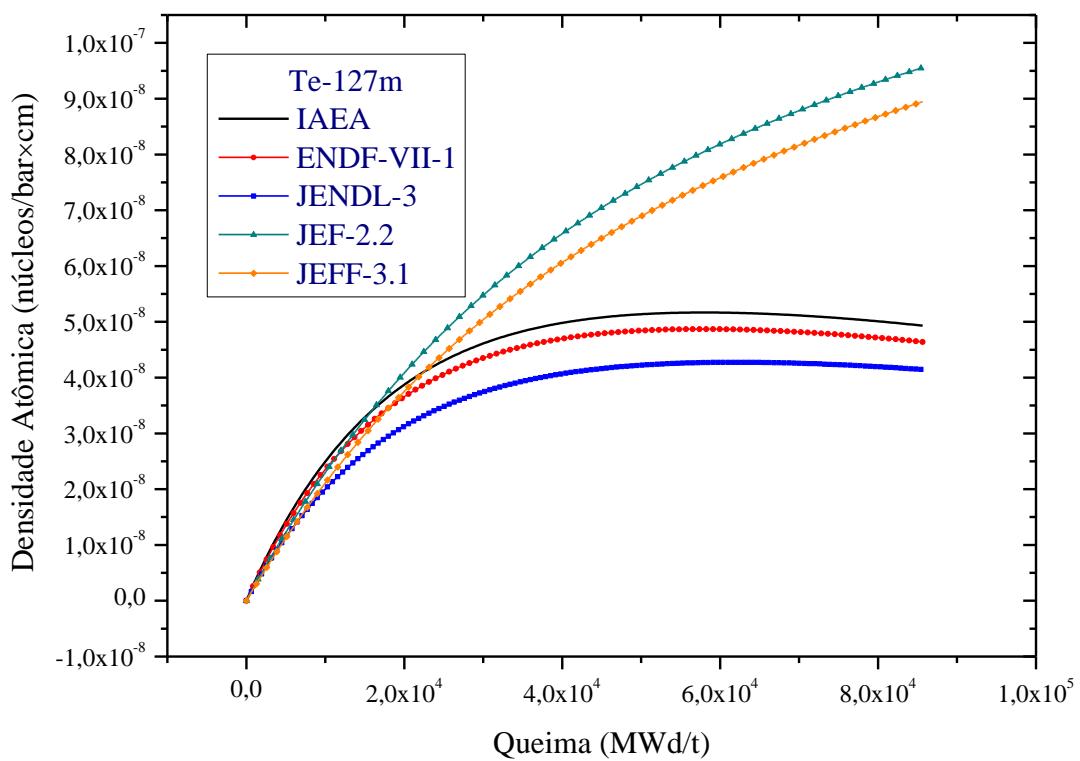


Figura 70: Variação de densidade atômica do $^{127\text{m}}\text{Te}$ em função da queima.

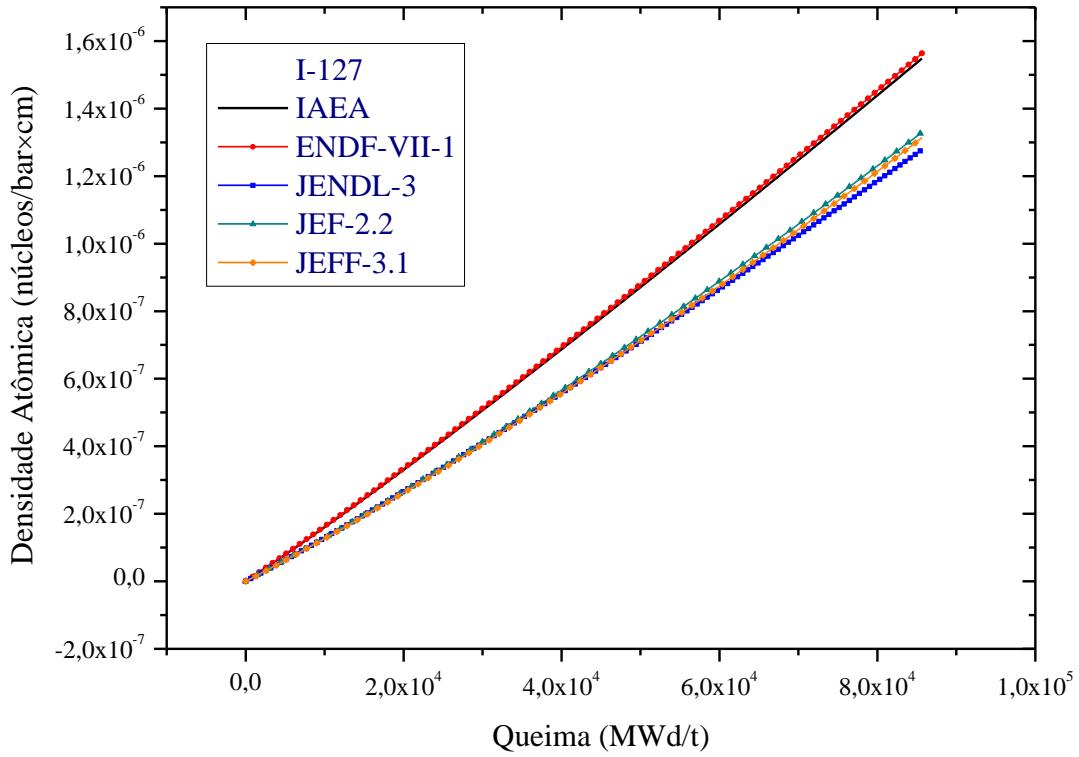


Figura 71: Variação de densidade atômica ^{127}I em função da queima.

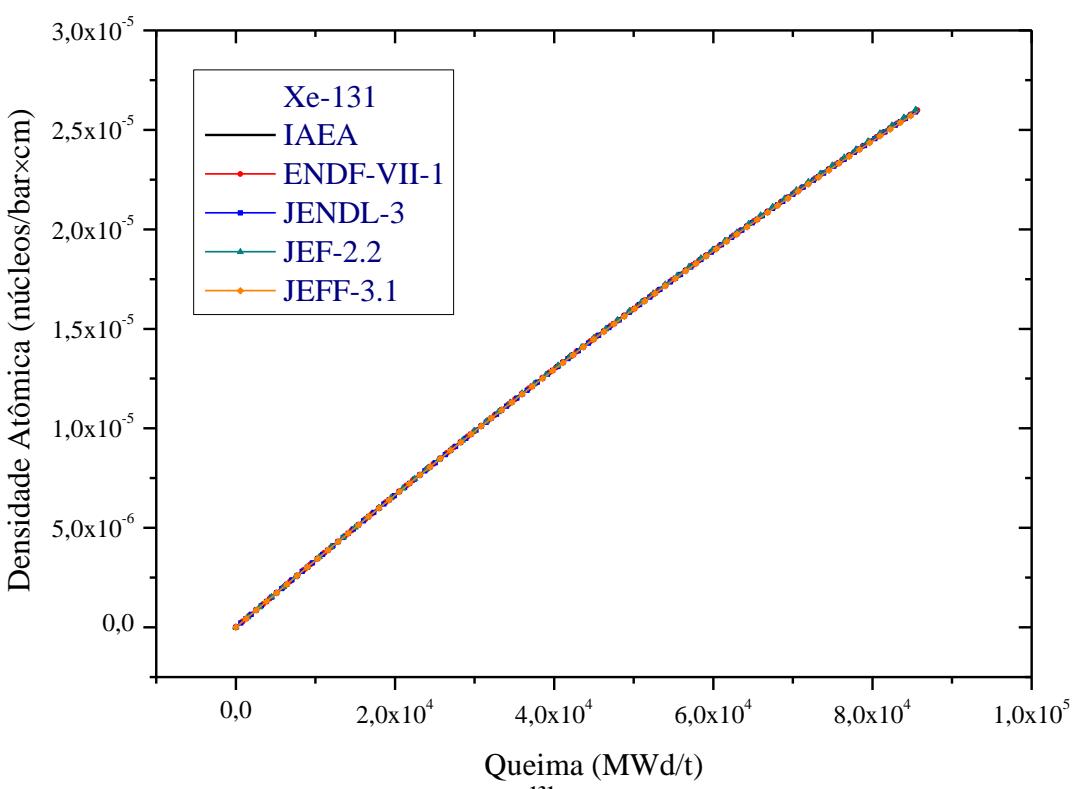


Figura 72: Variação de densidade atômica do ^{131}Xe em função da queima.

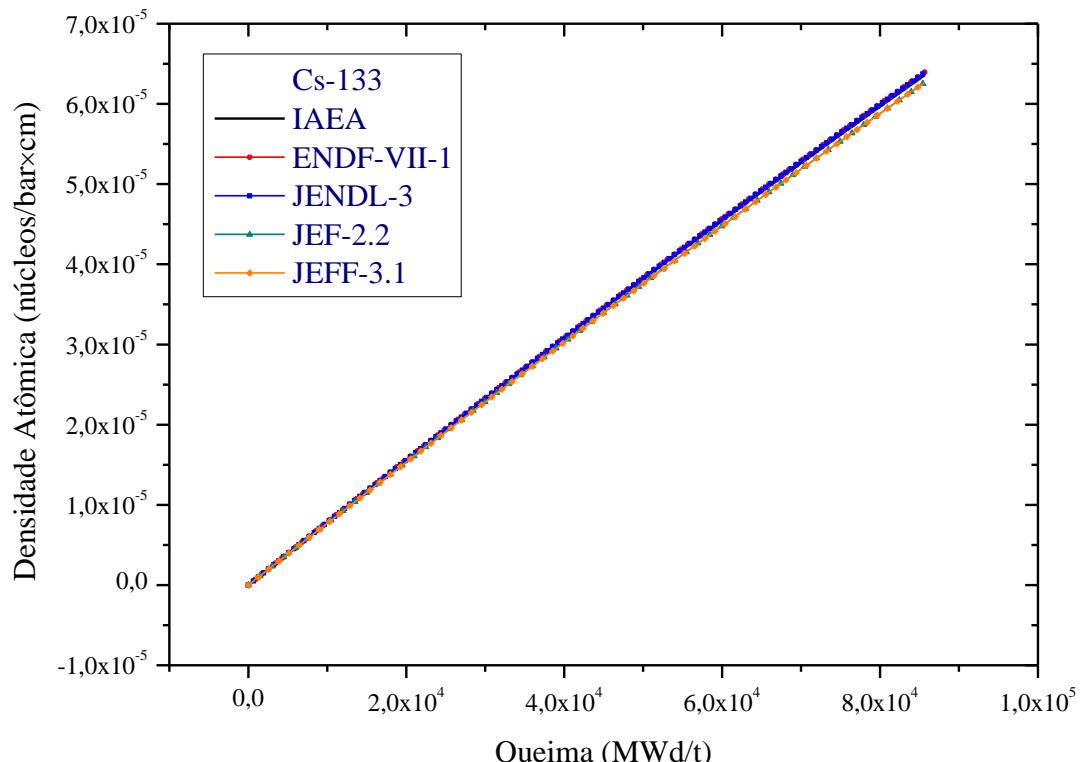


Figura 73: Variação de densidade atômica do ^{133}Cs em função da queima.

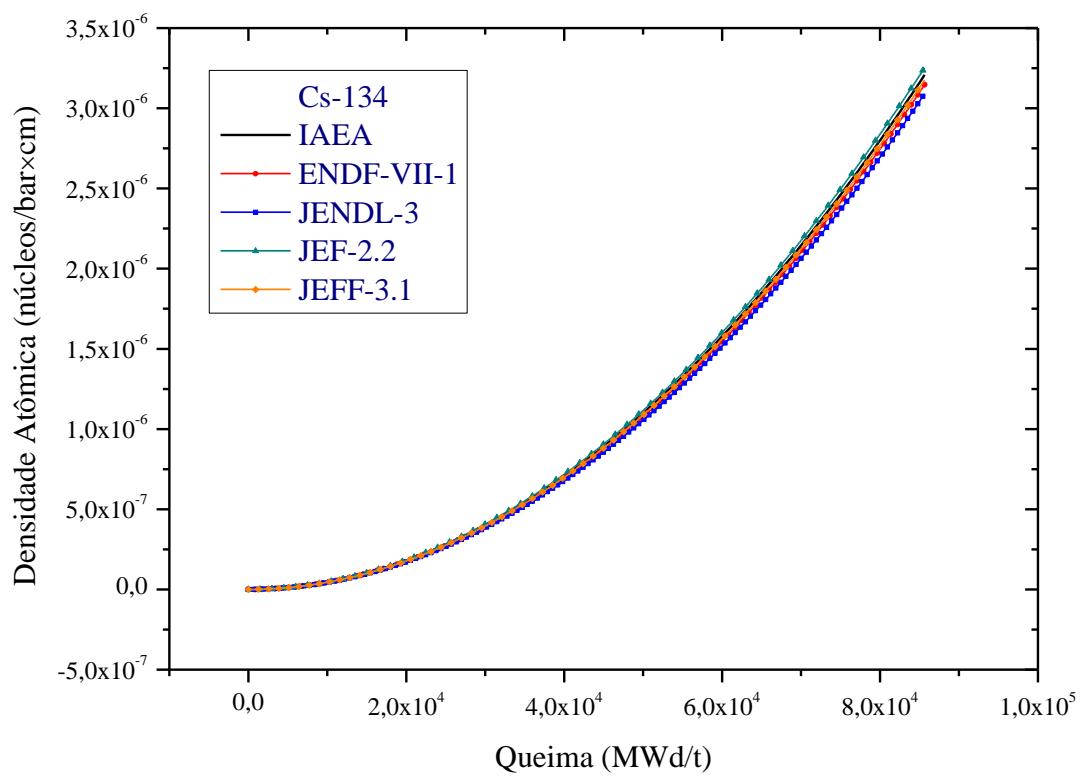


Figura 74: Variação de densidade atômica do ^{134}Cs em função da queima.

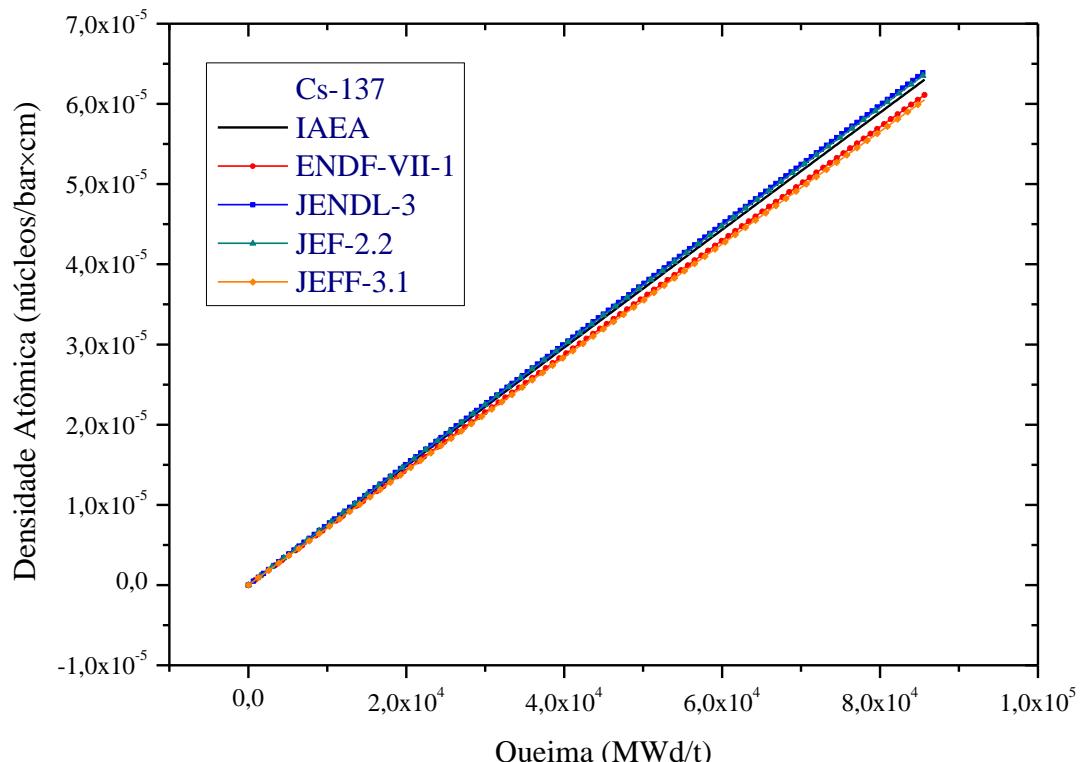


Figura 75: Variação de densidade atômica do ^{137}Cs em função da queima.

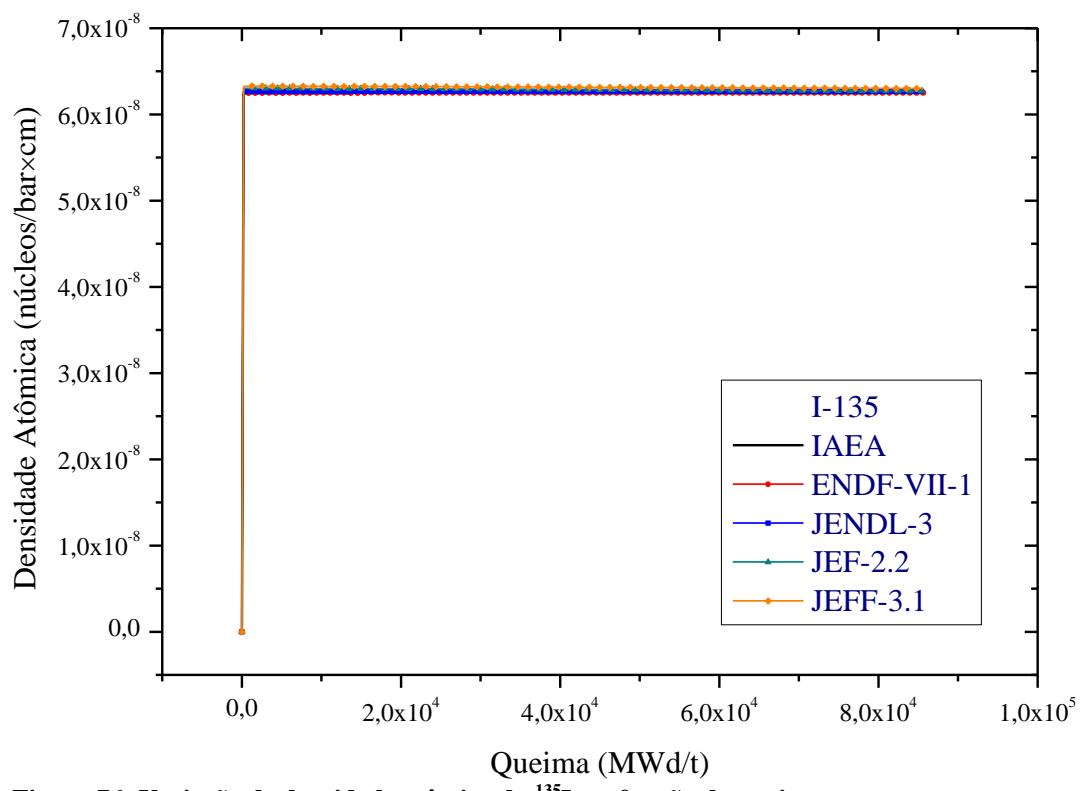


Figura 76: Variação de densidade atômica do ^{135}I em função da queima.

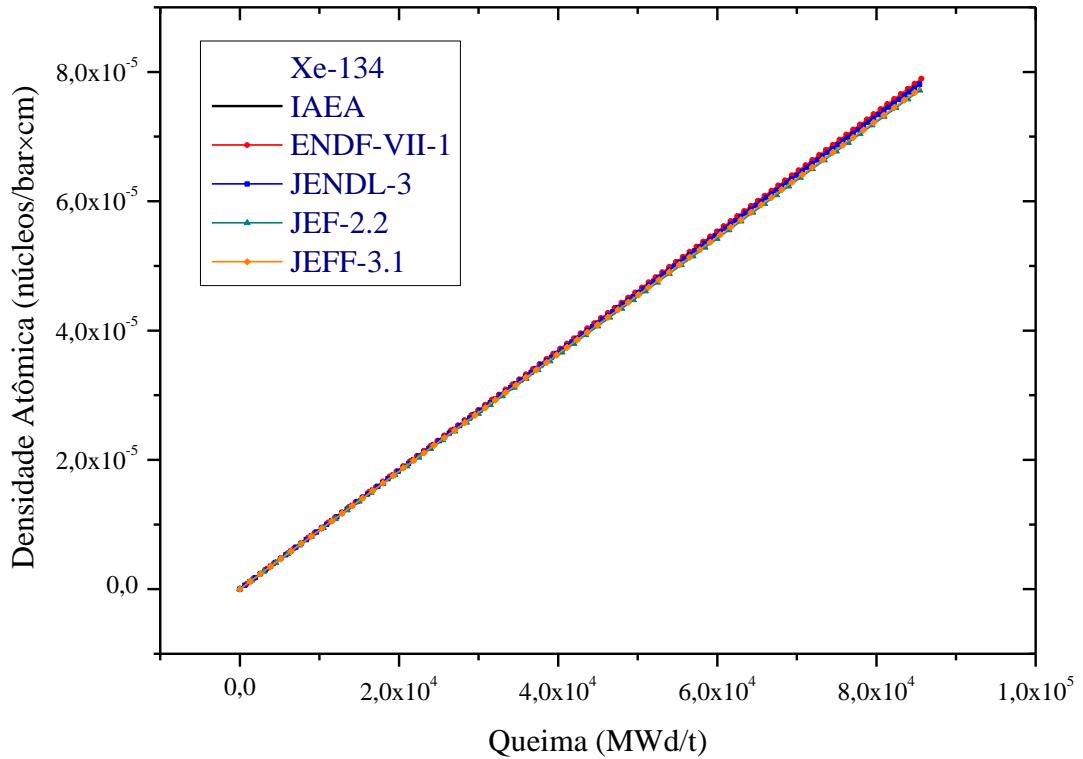


Figura 77: Variação de densidade atômica do ^{134}Xe em função da queima.

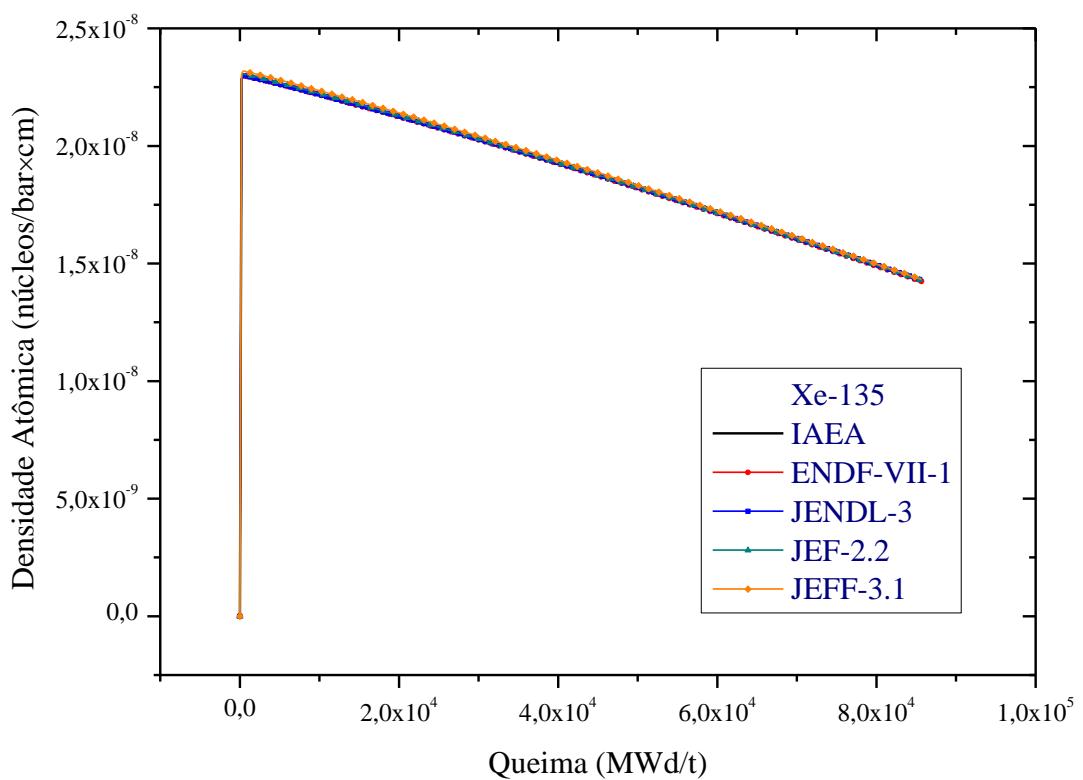


Figura 78: Variação de densidade atômica do ^{135}Xe em função da queima.

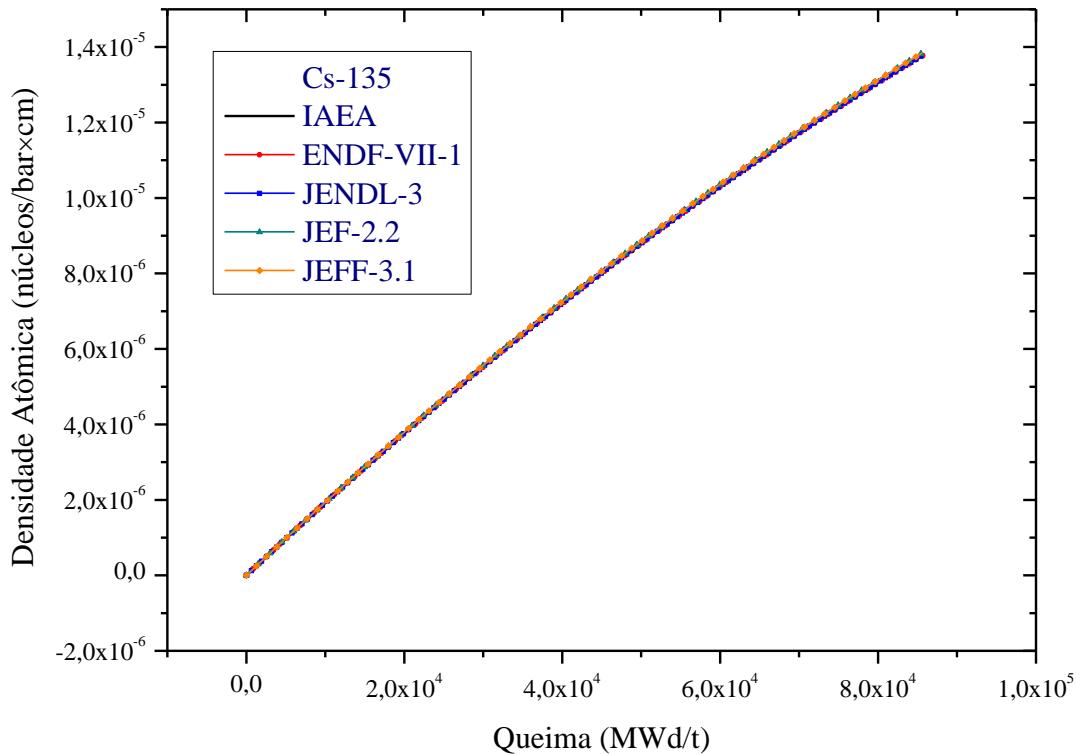


Figura 79: Variação de densidade atômica do ^{135}Cs em função da queima.

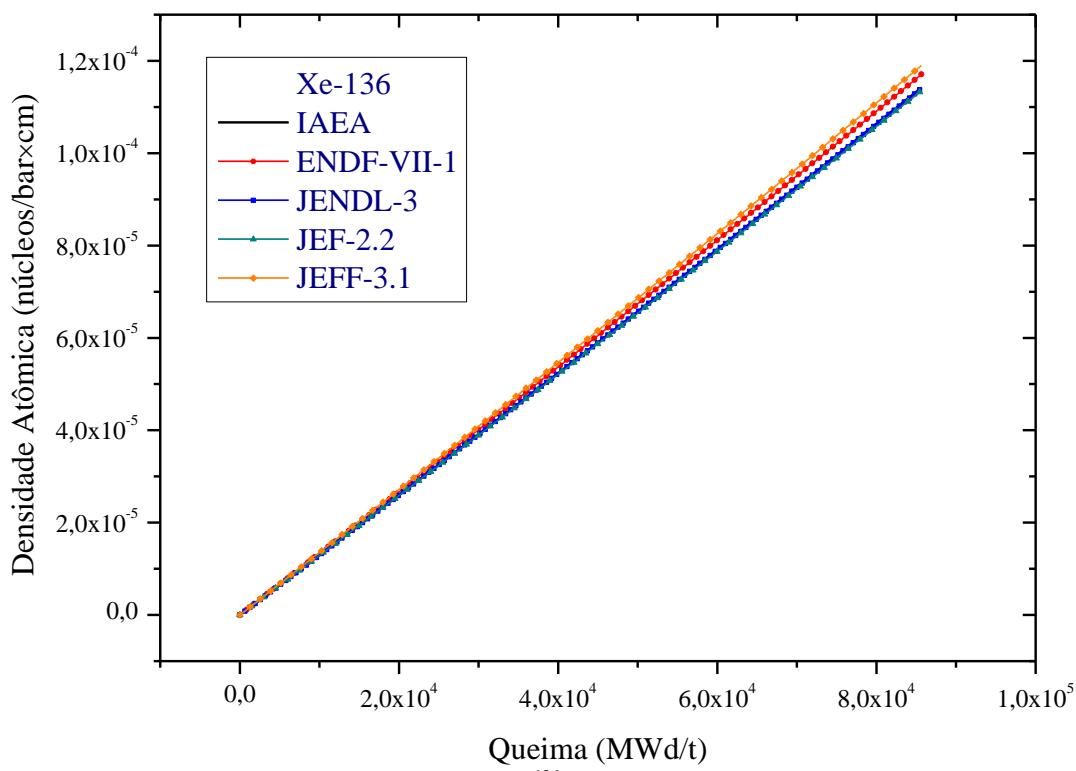


Figura 80: Variação de densidade atômica do ^{136}Xe em função da queima.

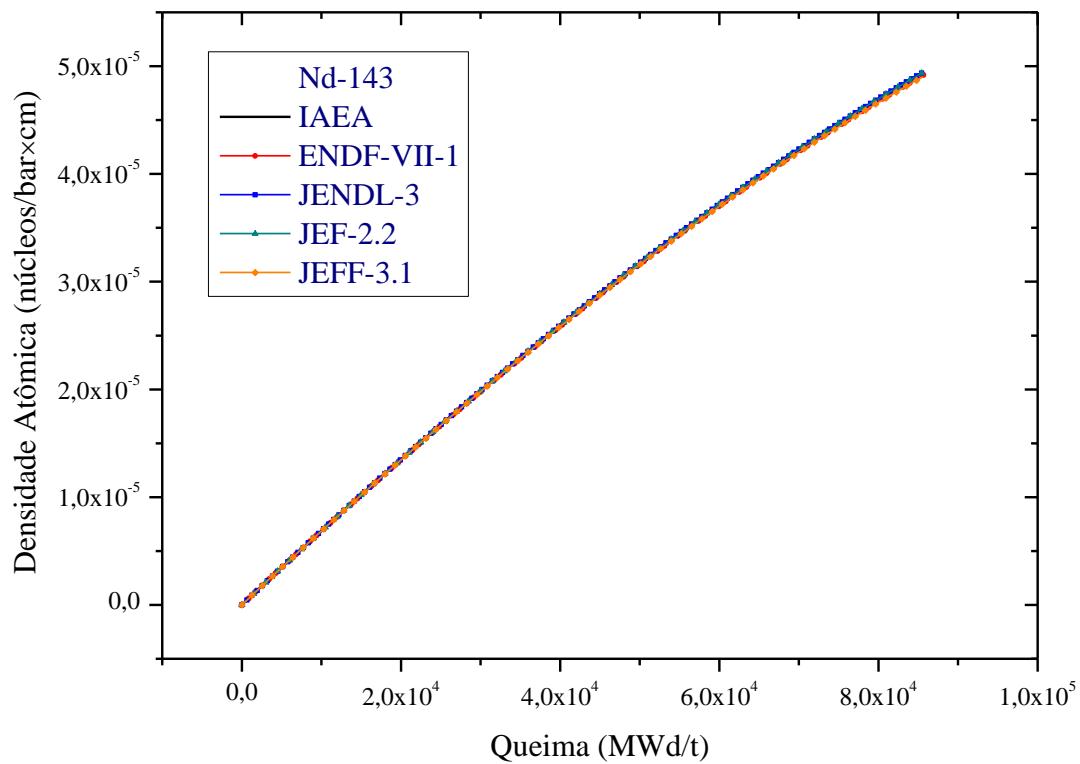


Figura 81: Variação de densidade atômica do ^{143}Nd em função da queima.

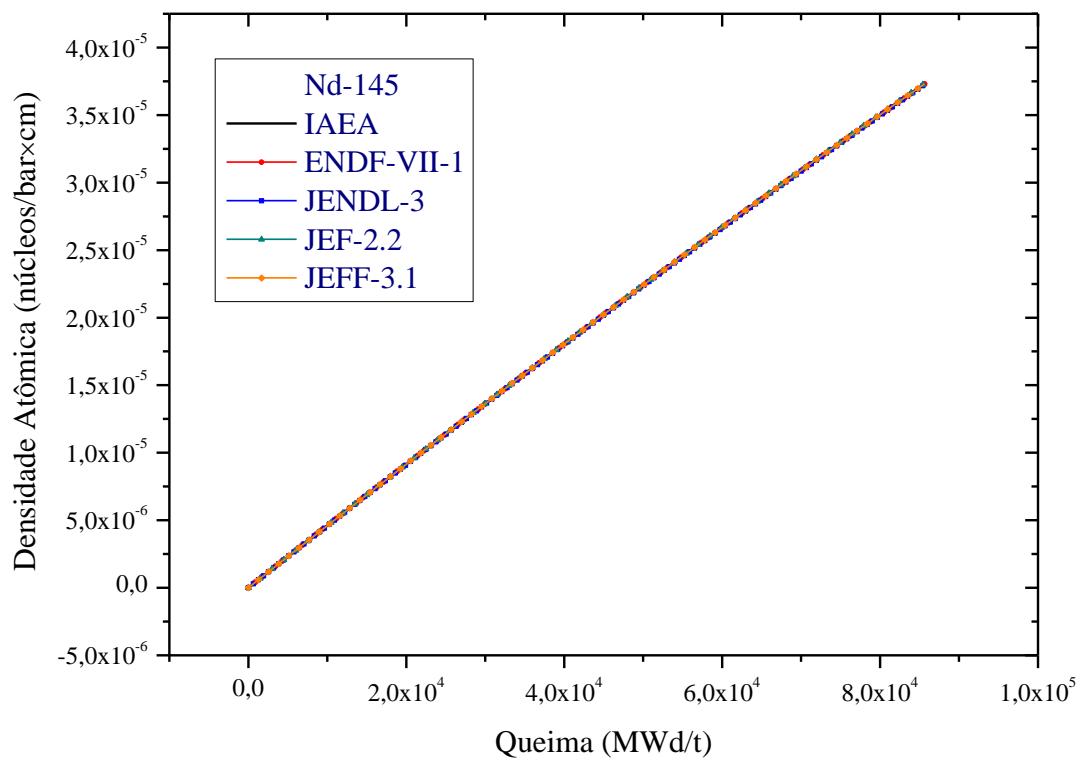


Figura 82: Variação de densidade atômica do ^{145}Nd em função da queima.

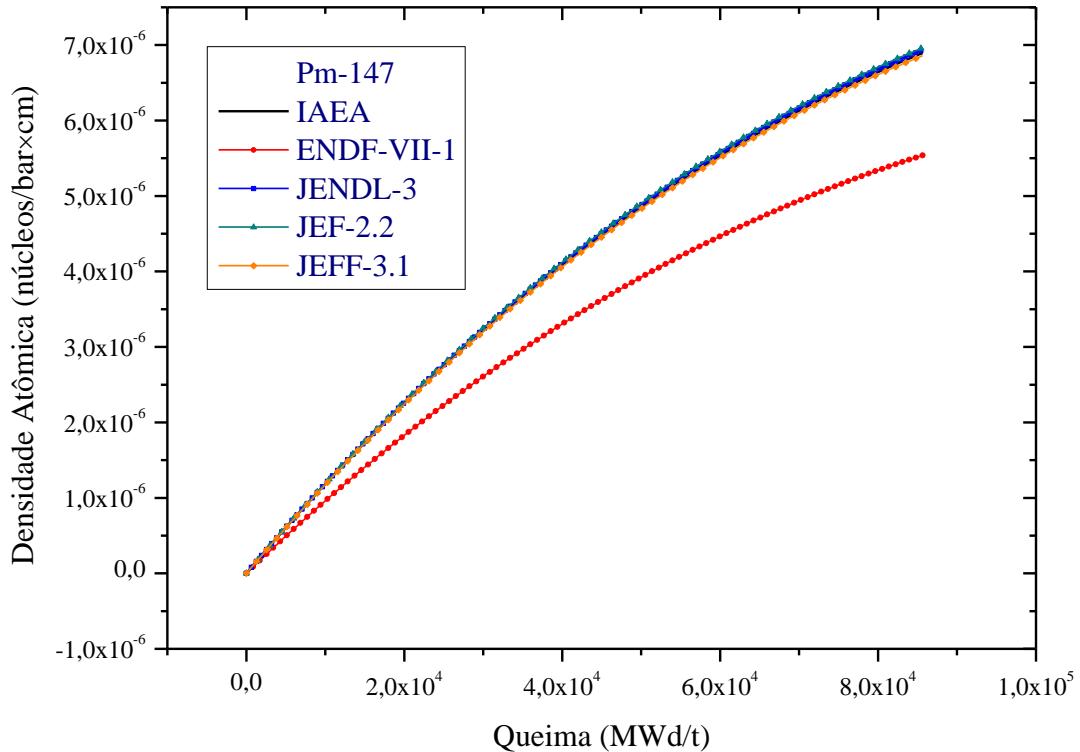


Figura 83: Variação de densidade atômica do ^{147}Pm em função da queima.

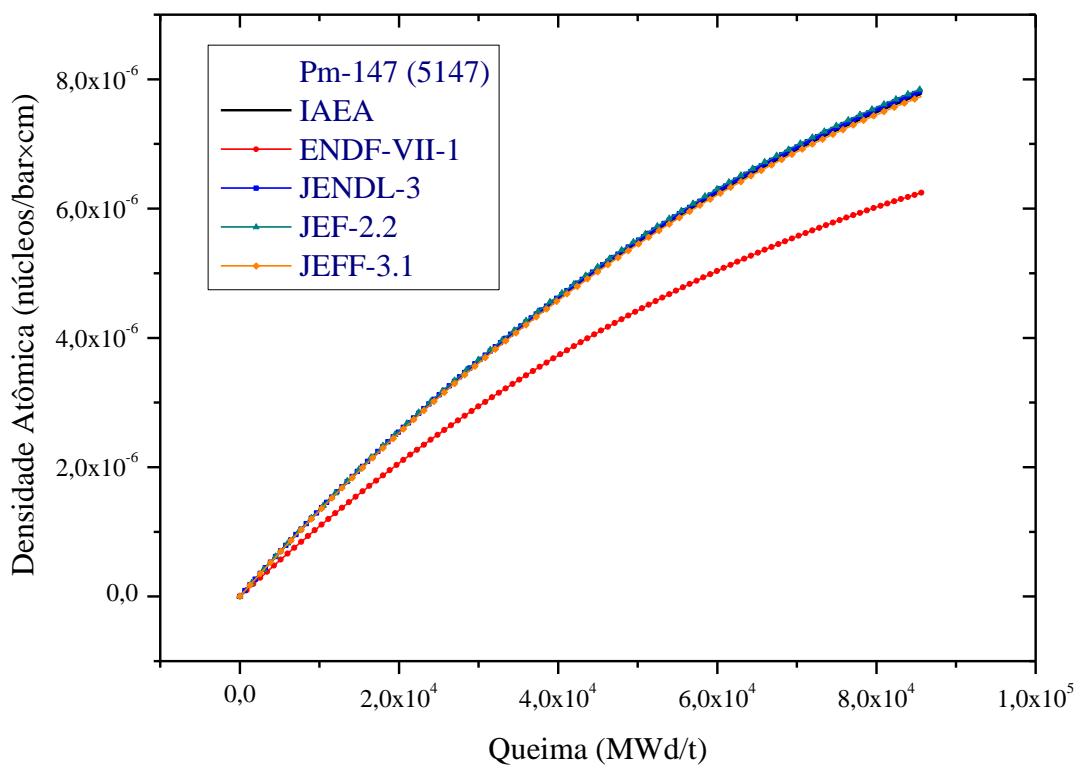


Figura 84: Variação de densidade do ^{147}Pm (5147) em função da queima.

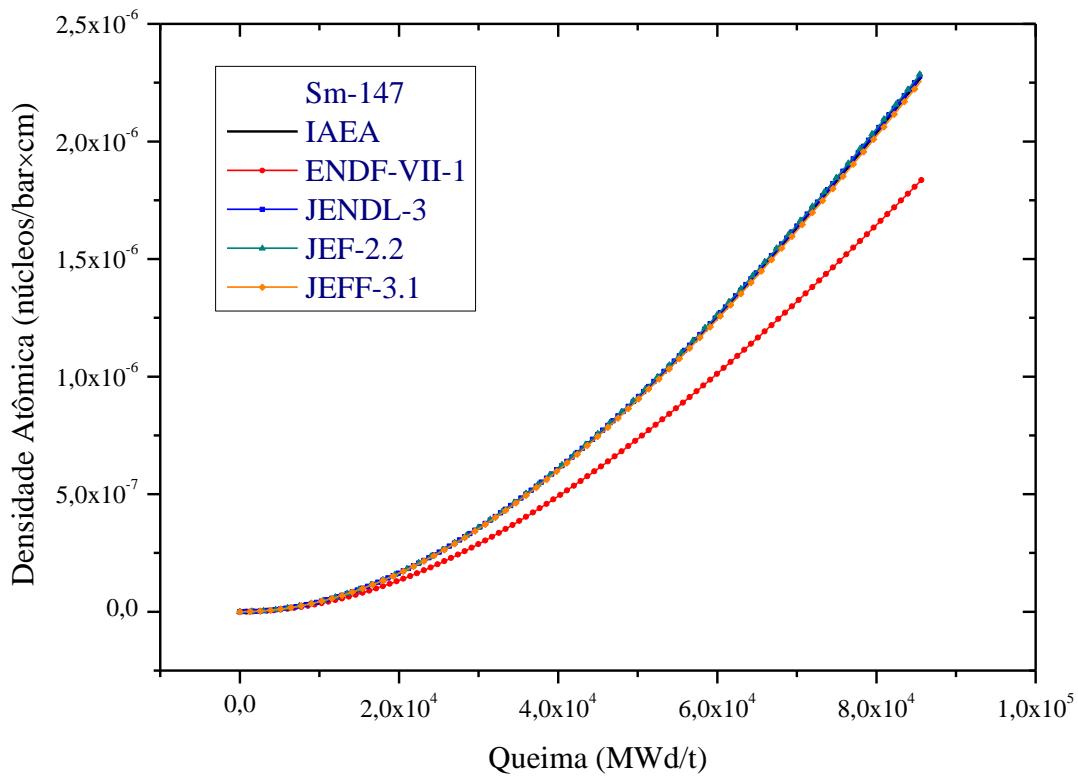


Figura 85: Variação de densidade atômica do ^{147}Sm em função da queima.

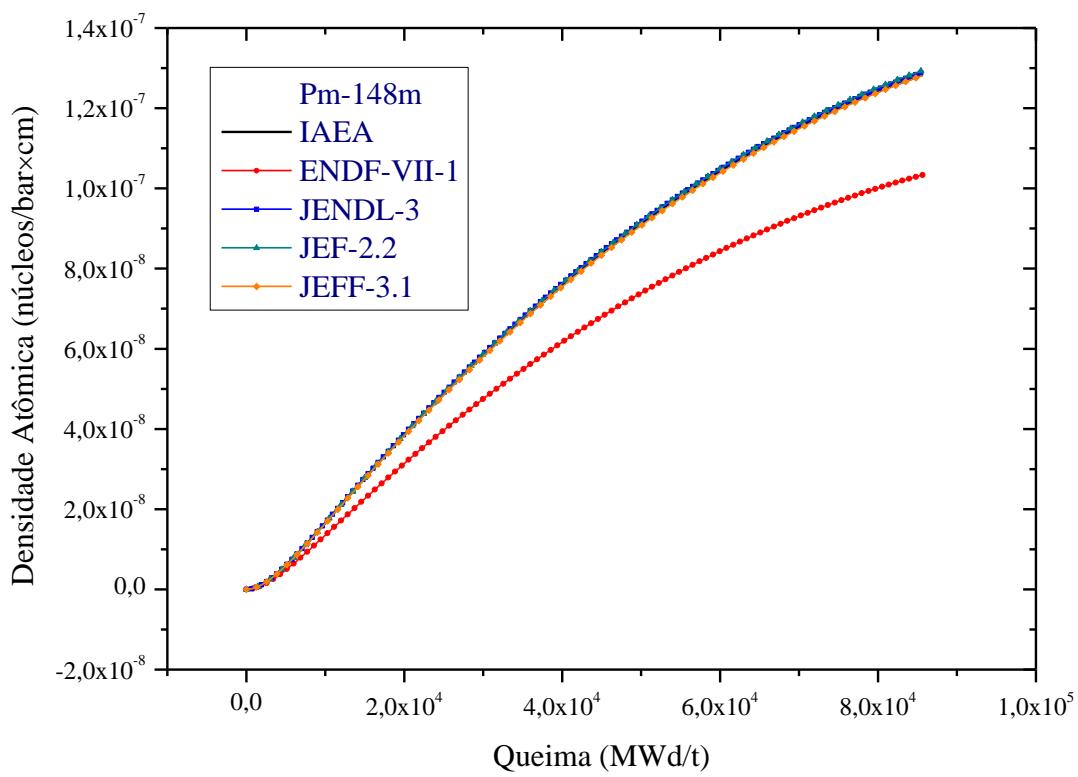


Figura 86: Variação de densidade do $^{148\text{m}}\text{Pm}$ em função da queima.

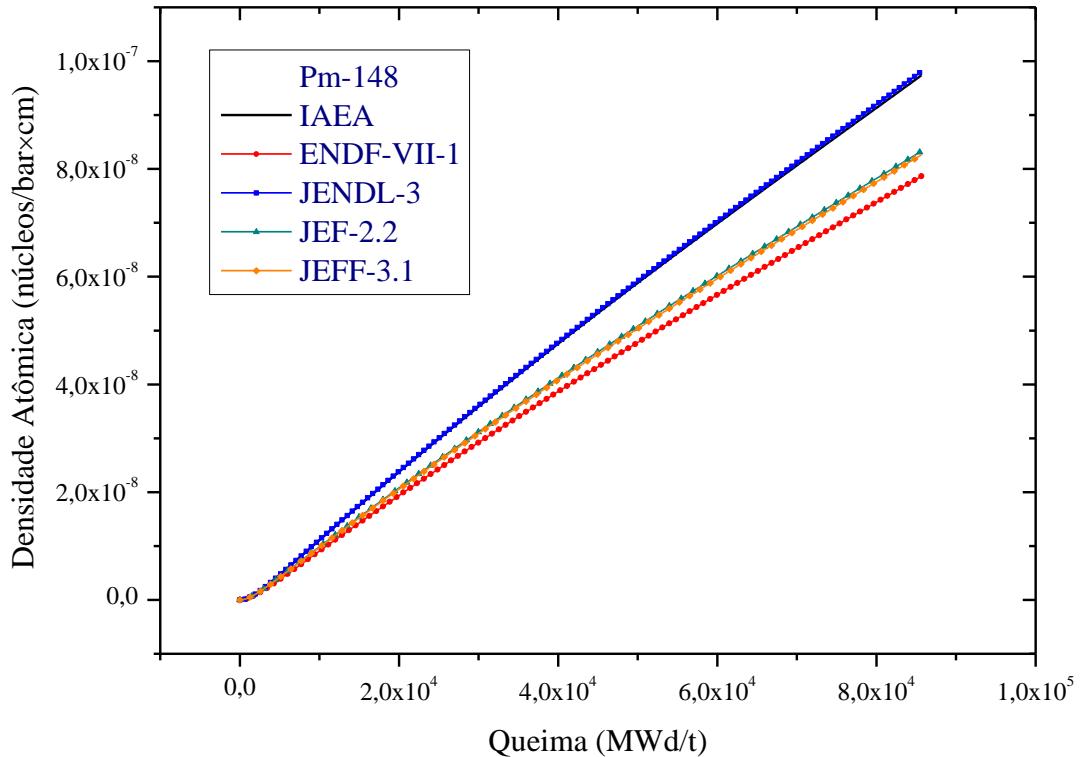


Figura 87: Variação de densidade atômica do ^{148}Pu em função da queima.

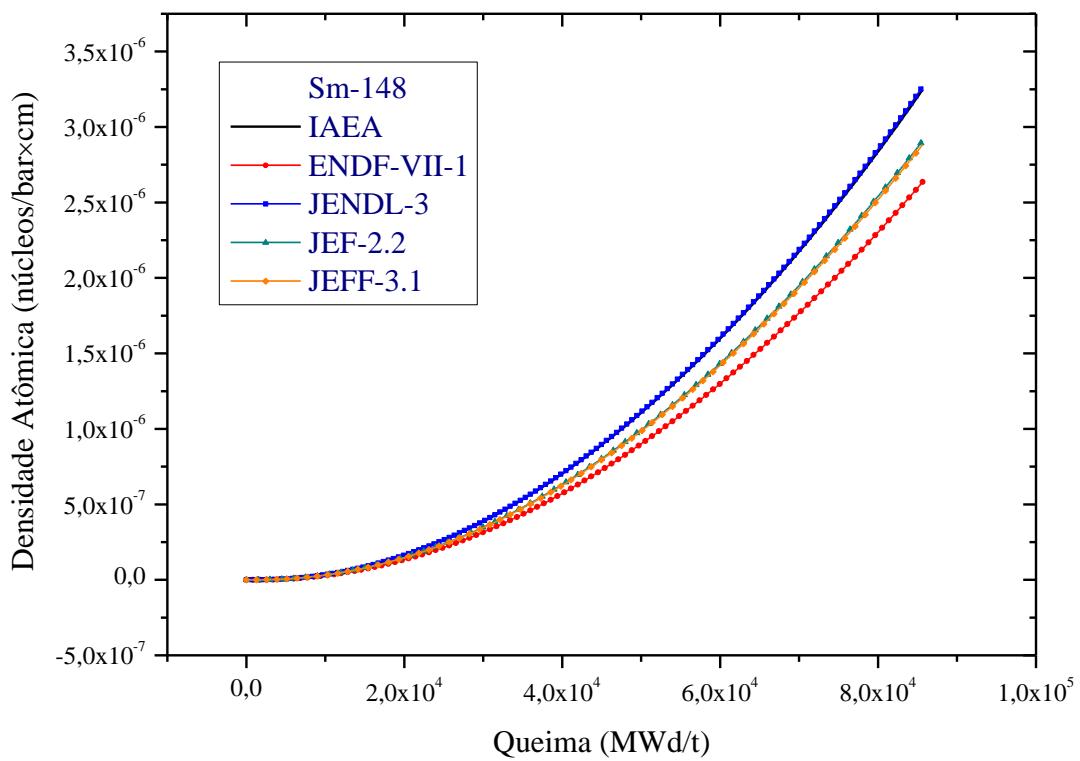


Figura 88: Variação de densidade atômica do ^{148}Sm em função da queima.

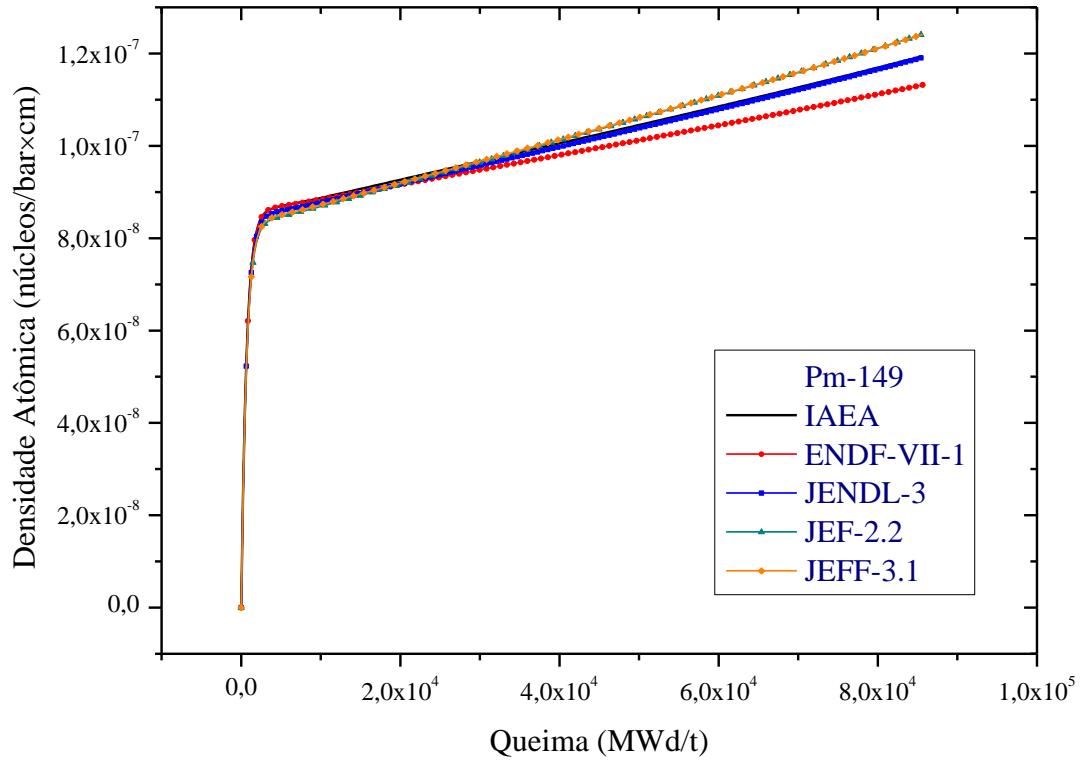


Figura 89: Variação de densidade atômica do ^{149}Pu em função da queima.

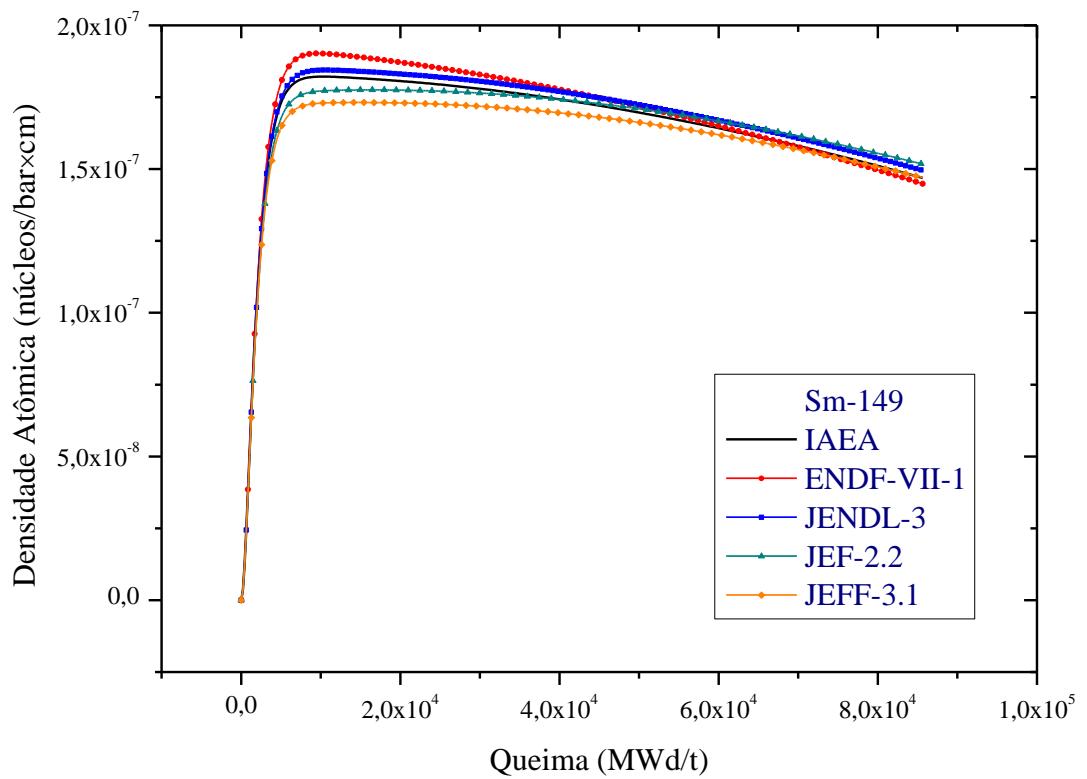


Figura 90: Variação de densidade atômica do ^{149}Sm em função da queima.

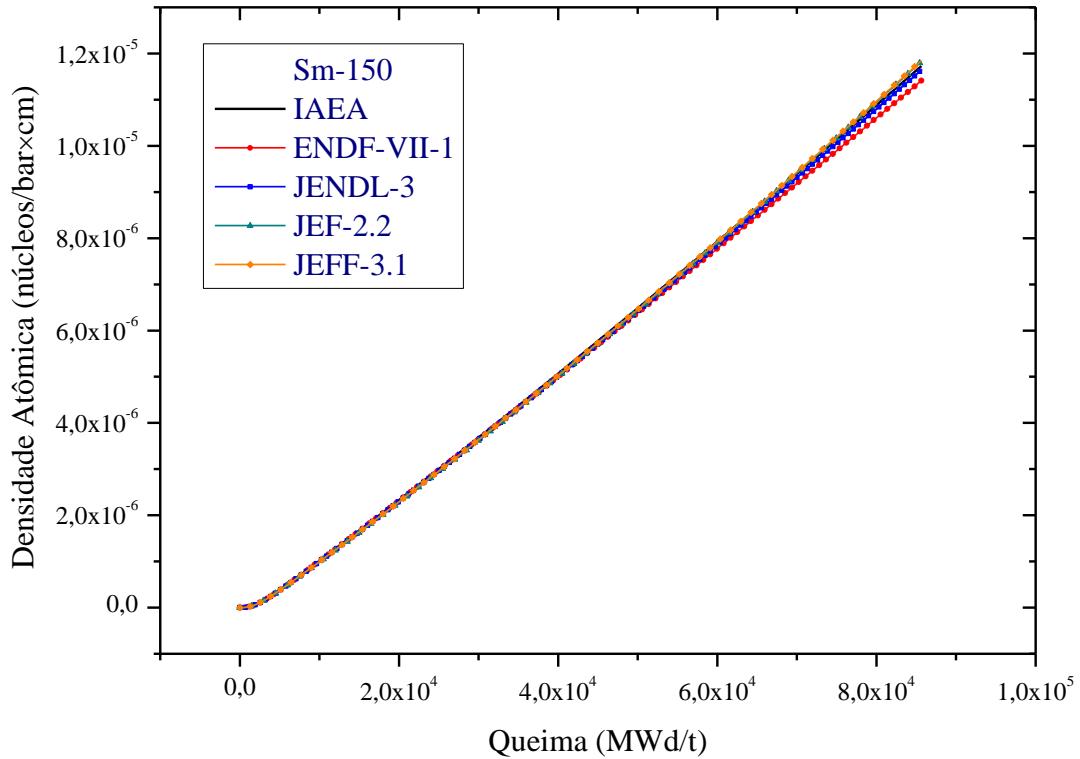


Figura 91: Variação de densidade atômica do ^{150}Sm em função da queima.

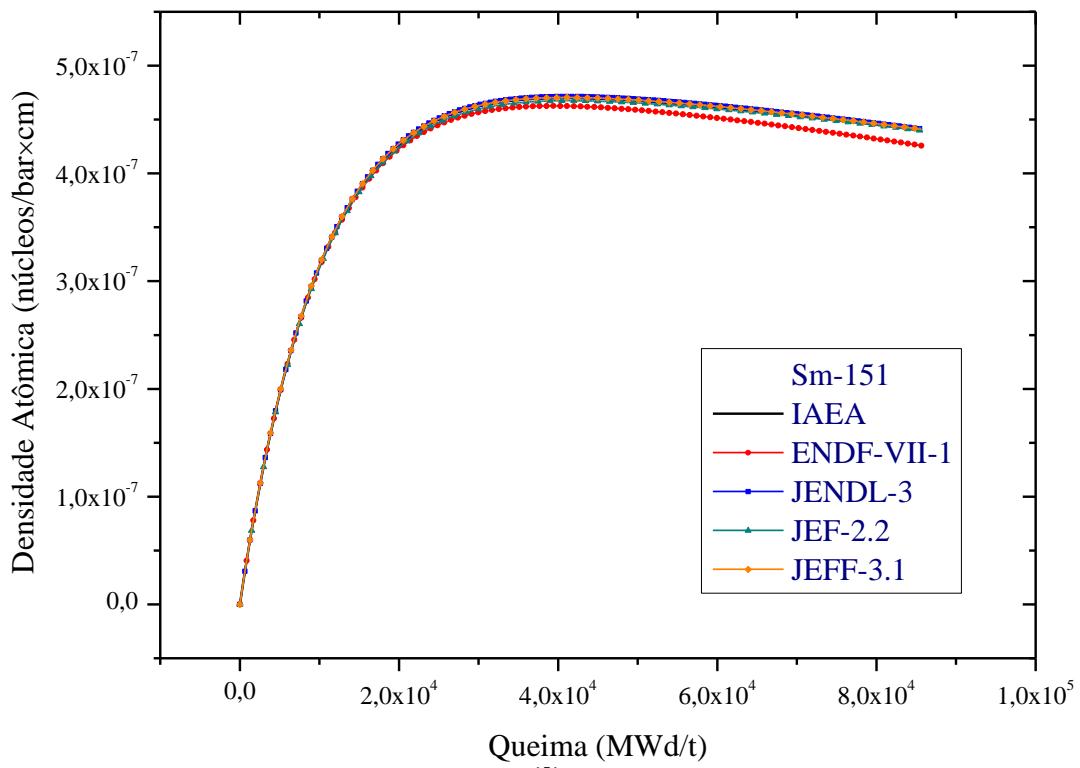


Figura 92: Variação de densidade atômica do ^{151}Sm em função da queima.

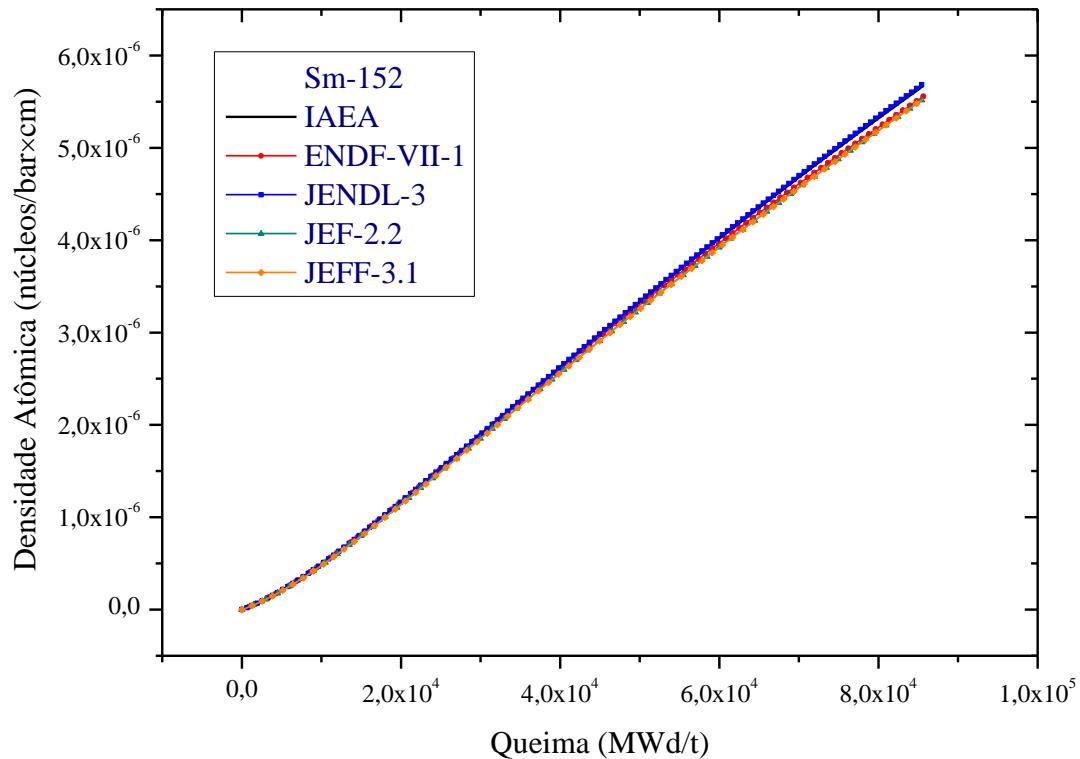


Figura 93: Variação de densidade atômica do ^{152}Sm em função da queima.

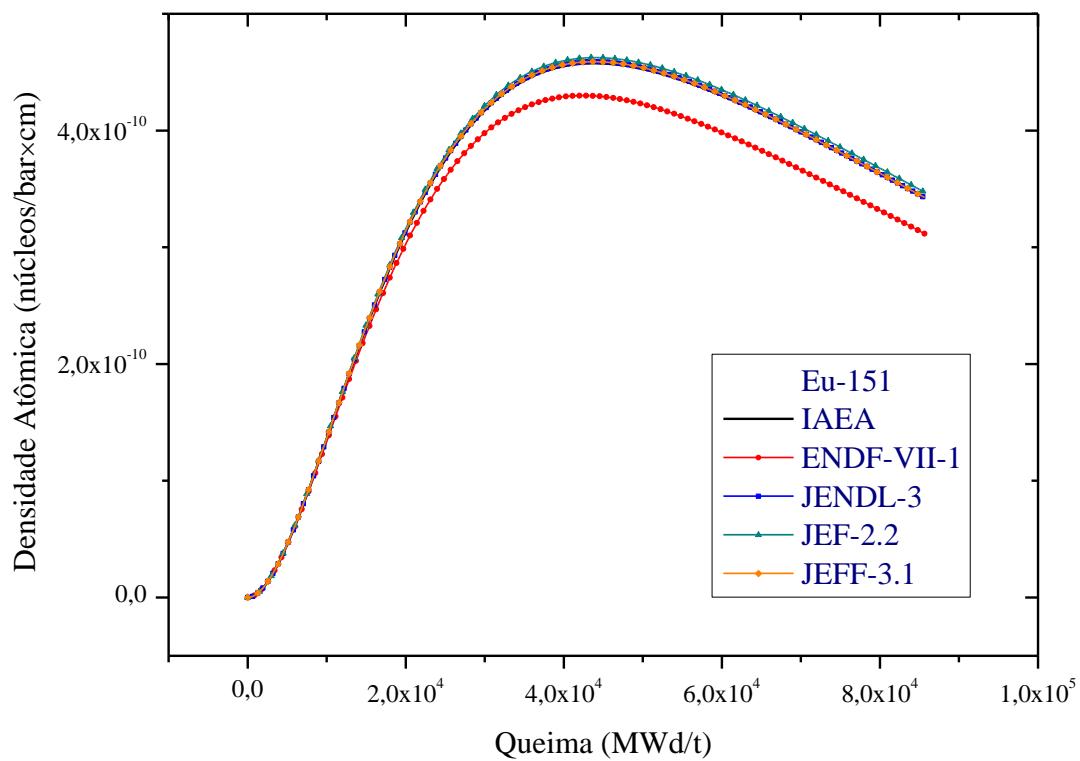


Figura 94: Variação de densidade atômica do ^{151}Eu em função da queima.

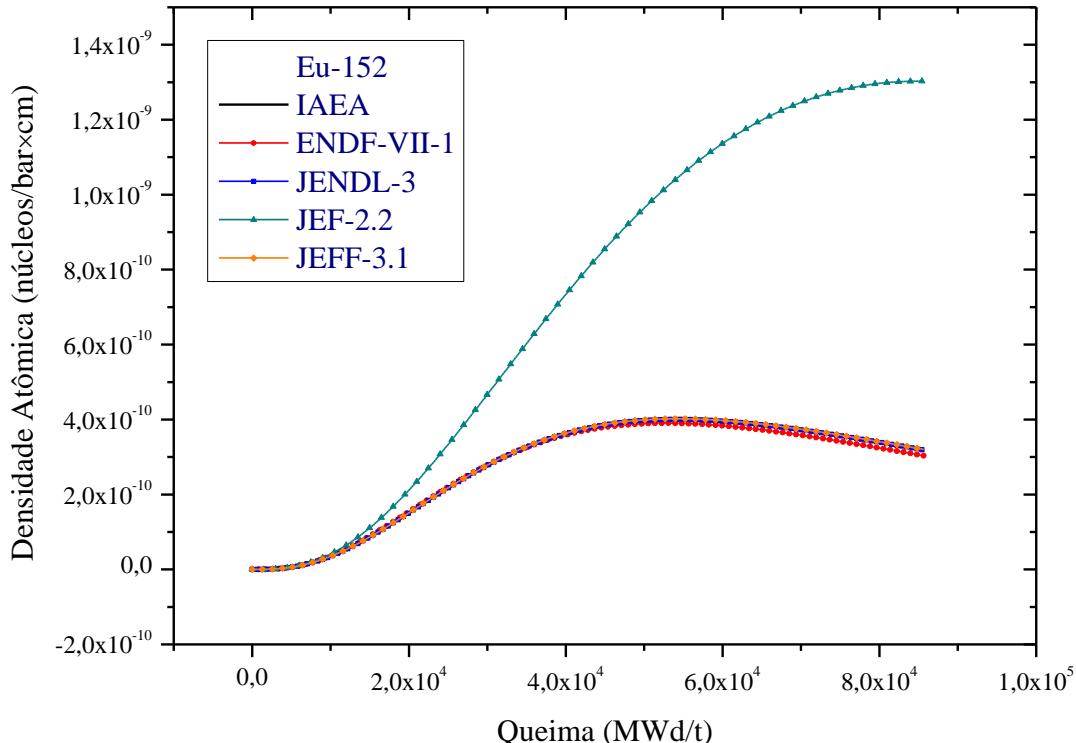


Figura 95: Variação de densidade atômica do ^{152}Eu em função da queima.

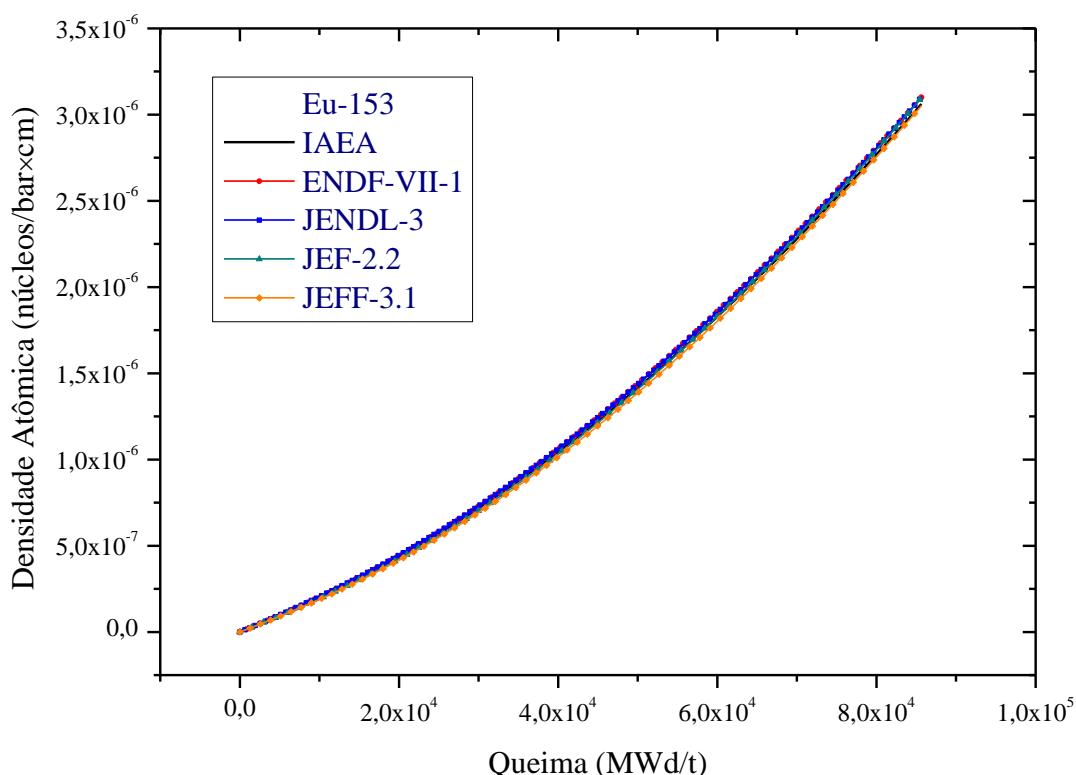


Figura 96: Variação de densidade atômica do ^{153}Eu em função da queima.

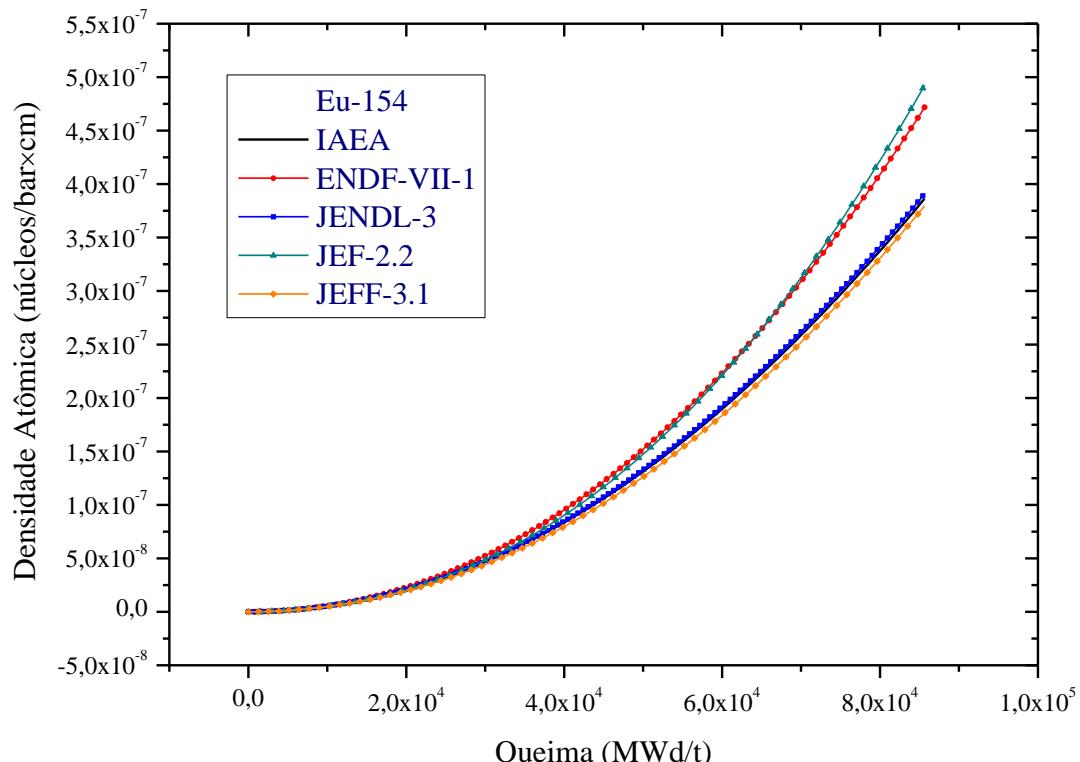


Figura 97: Variação de densidade atômica do ^{154}Eu em função da queima.

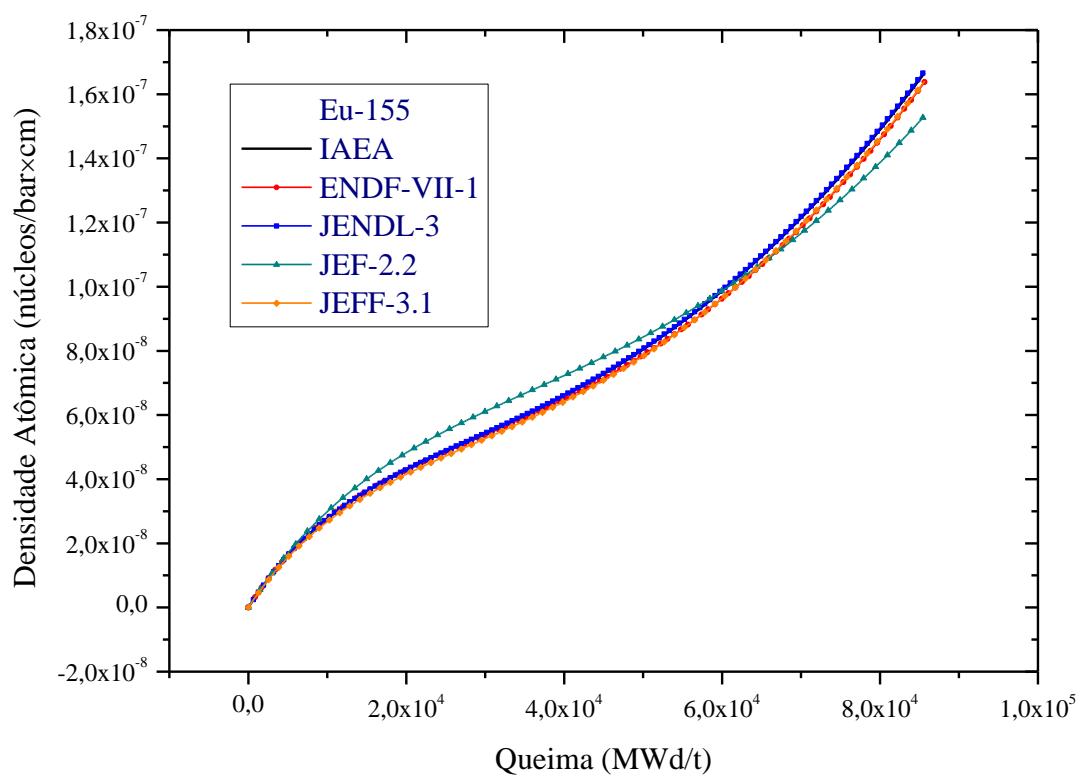


Figura 98: Variação de densidade atômica do ^{155}Eu em função da queima.

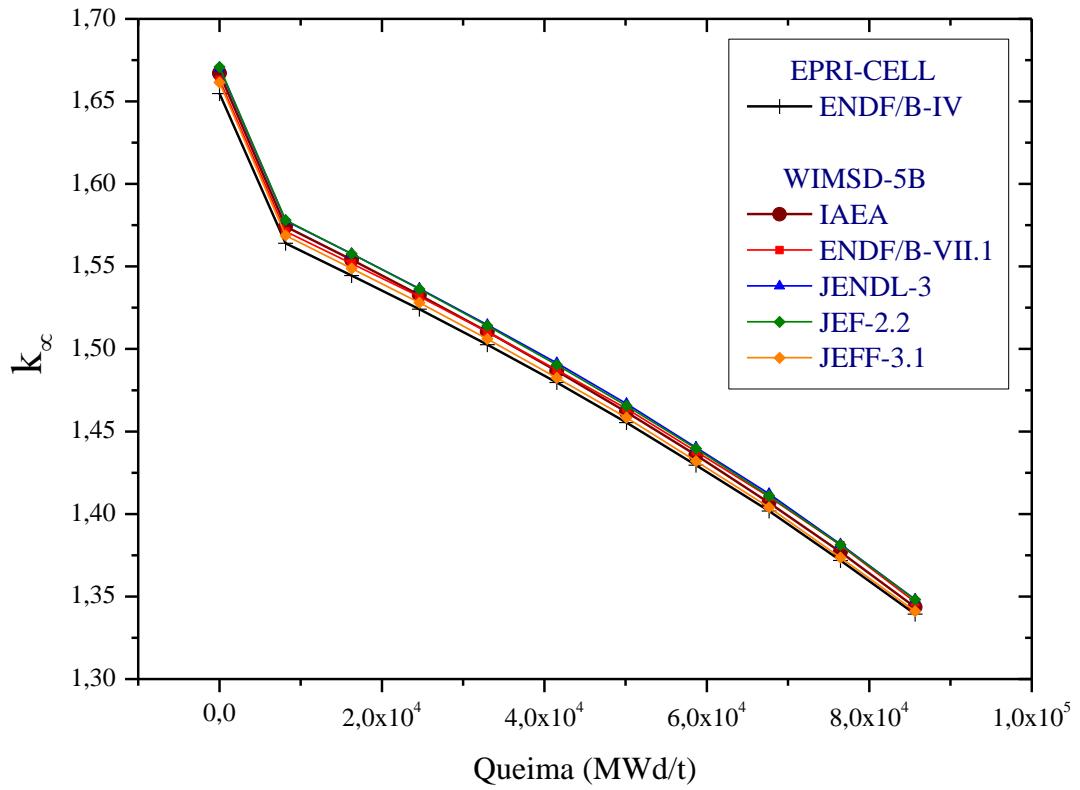


Figura 99: Variação de k_{∞} em função da queima - Comparação com o código EPRI-CELL.

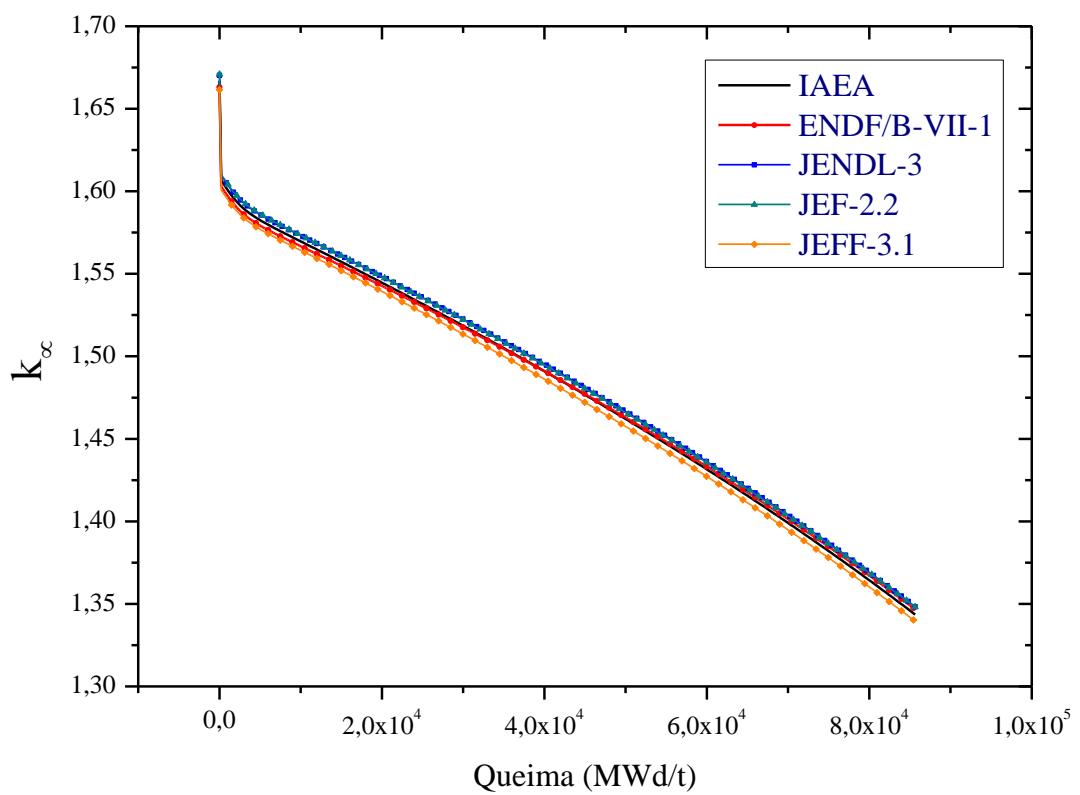


Figura 100: Variação de k_{∞} em função da queima.

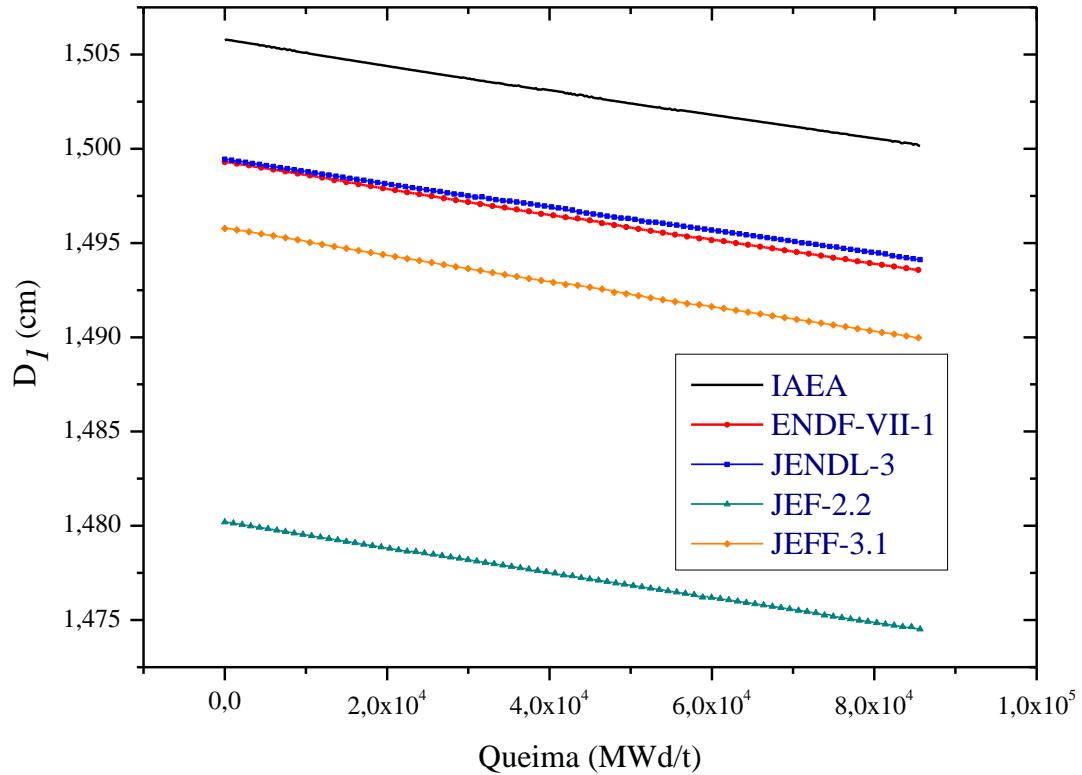


Figura 101: Variação de coeficiente de difusão rápido em função da queima.

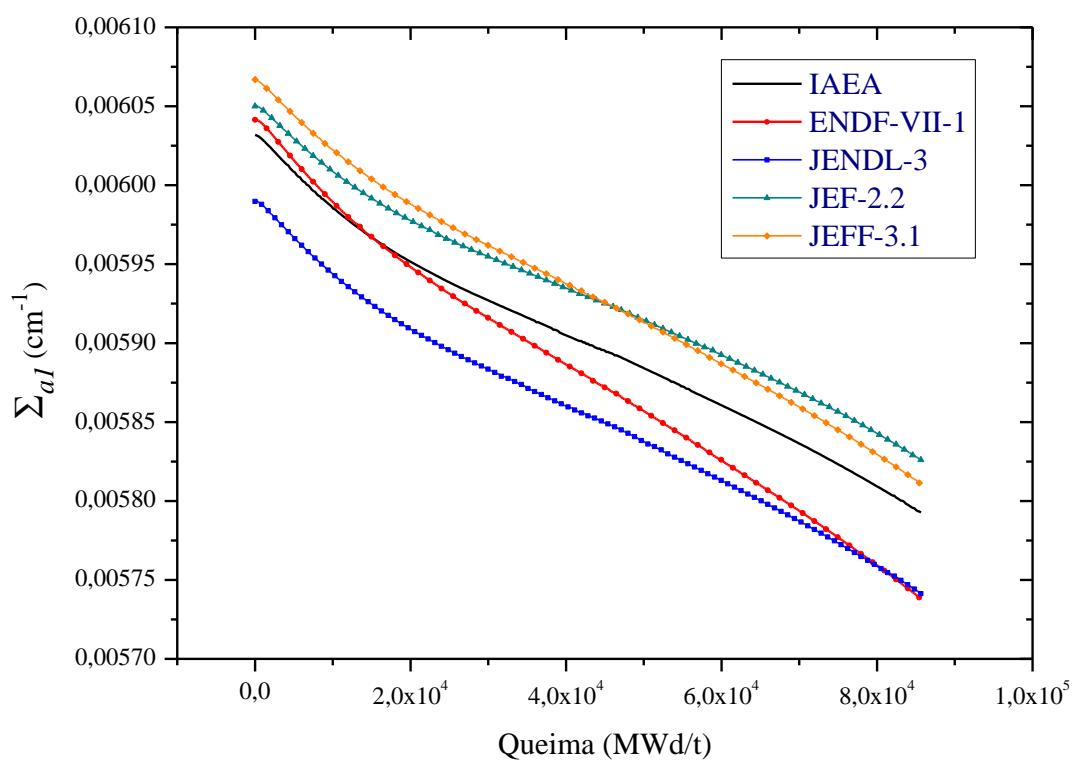


Figura 102: Variação da sessão de choque de absorção rápida em função da queima.

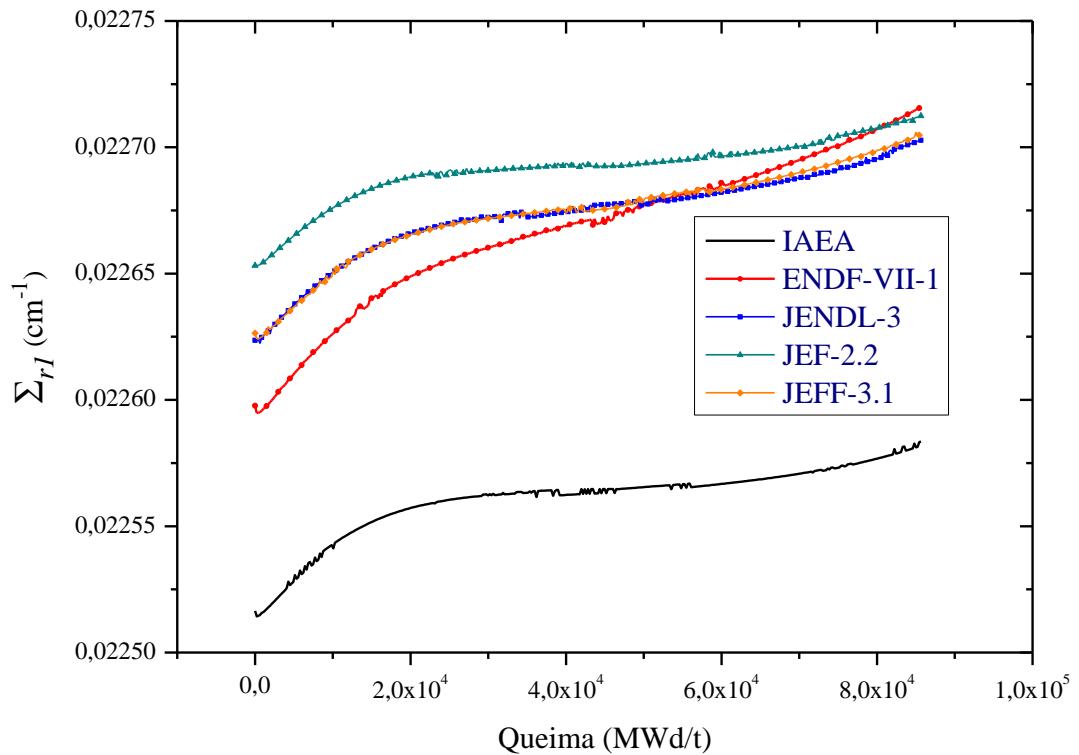


Figura 103: Variação da sessão de choque de remoção rápida em função da queima.

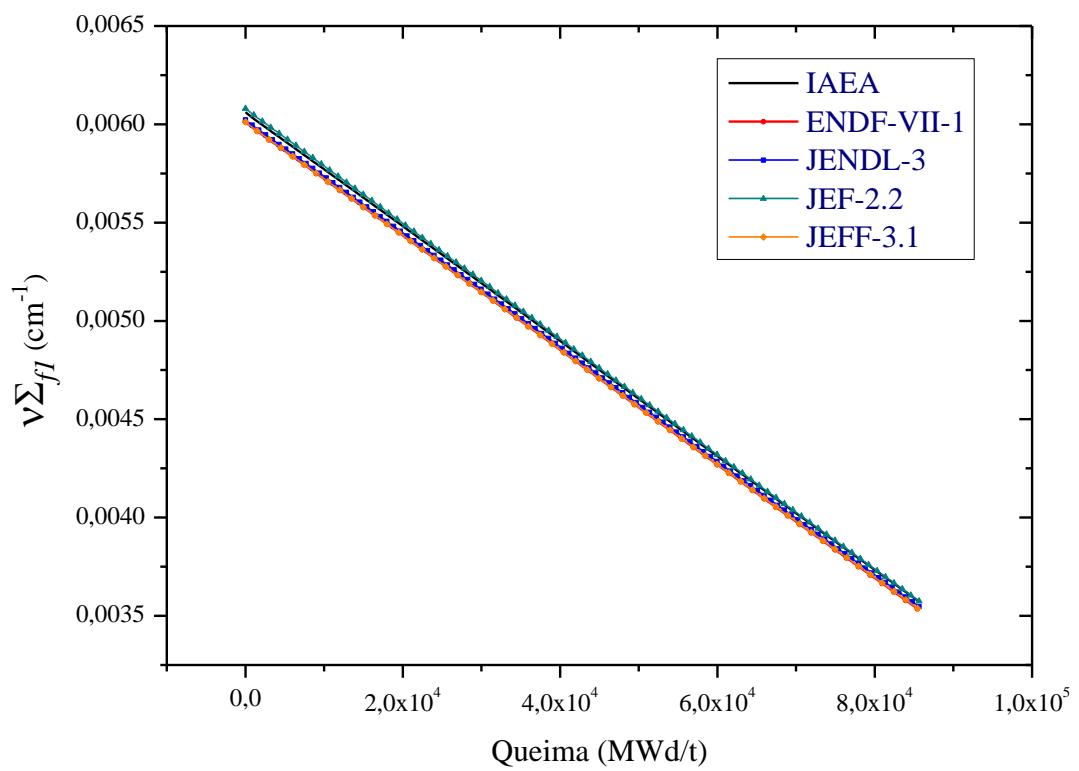


Figura 104: Variação da sessão de choque de fissão rápida em função da queima.

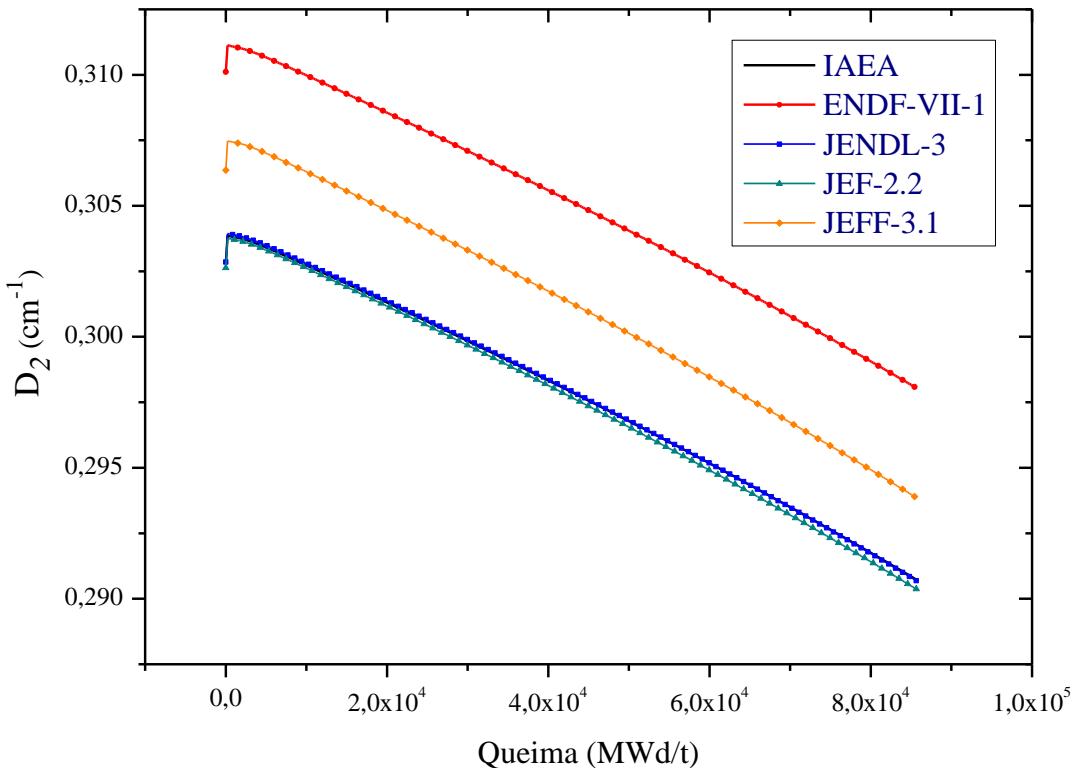


Figura 105: Variação do coeficiente de difusão térmico em função da queima.

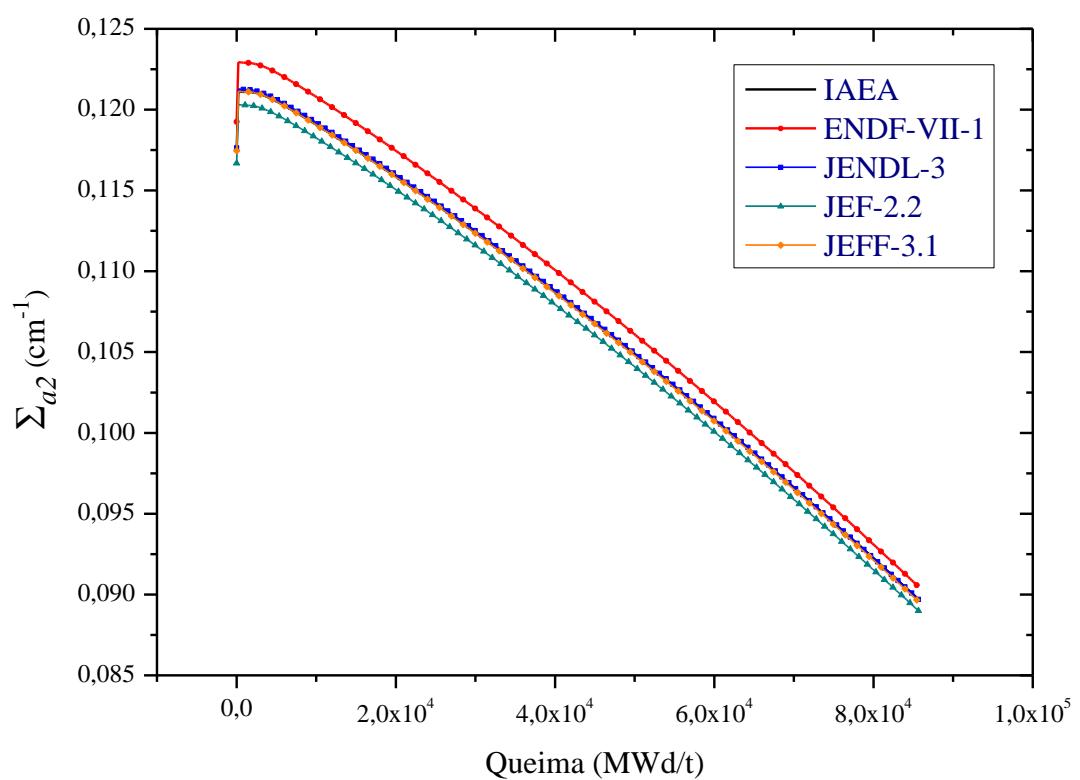


Figura 106: Variação da sessão de choque de absorção térmica em função da queima.

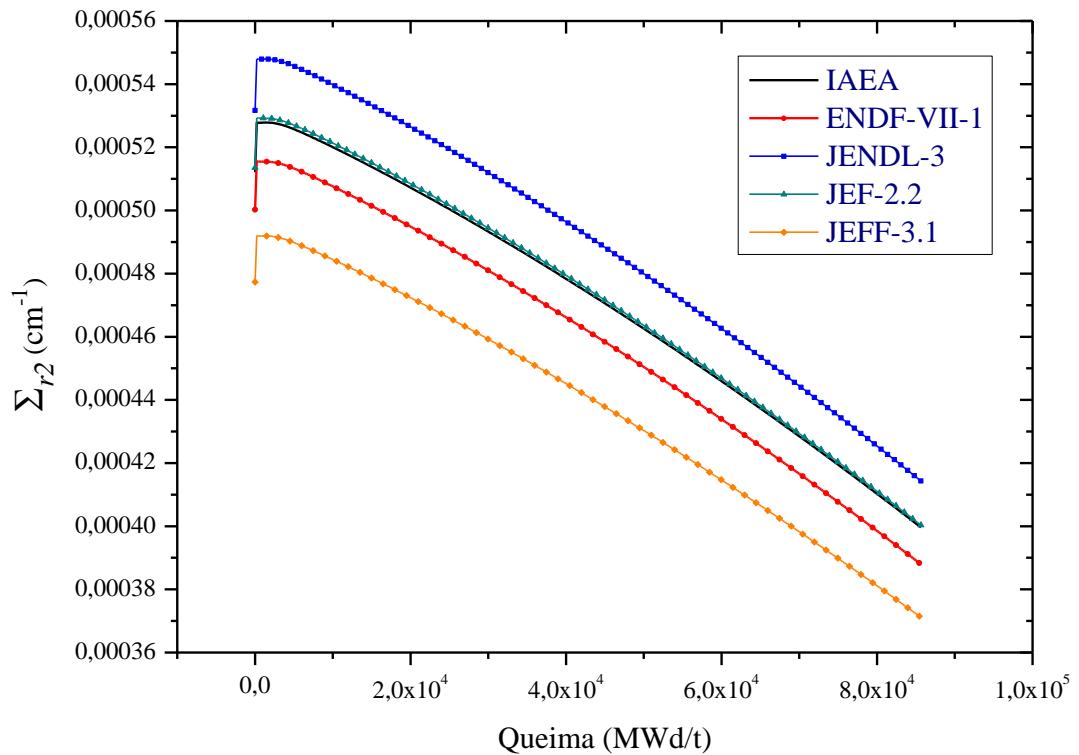


Figura 107: Variação da sessão de choque de remoção térmica em função da queima.

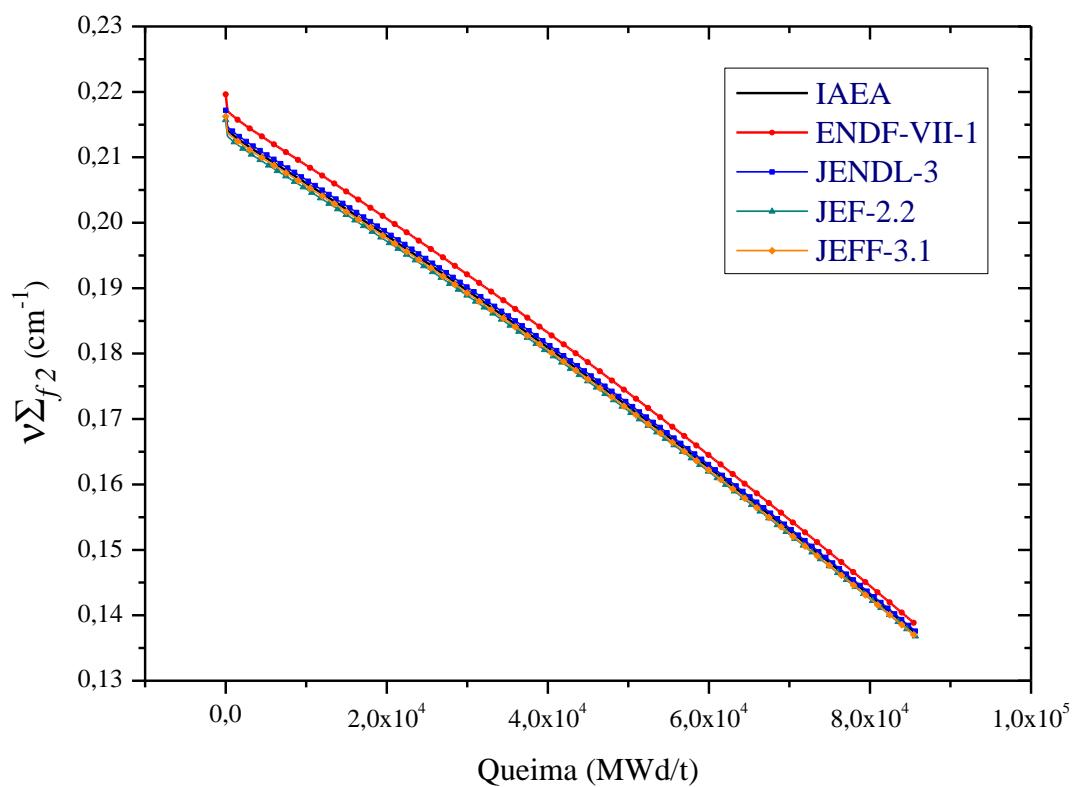


Figura 108: Variação da sessão de choque de fissão térmica em função da queima.

Tabela 5: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas IAEA e ENDF B-VII.1

IAEA e ENDFB-VII.1	
DRAP	Nuclídeo
$>1,9 \times 10^6$	Érbio-167 (2167)
1663,4	Érbio-166 2166
111,9	Amerício-242 1952
90,1	Cúrio-243 963
79,6	Cúrio-242 962
50,4	Plutônio-241 1241

Tabela 6: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas IAEA e JENDL3.2.

IAEA e JENDL3.2	
DRAP	Nuclídeo
134,3	Érbio-166 2166
124,2	Érbio-167 2167
85,2	Disprósio-160 160
62,5	Európio-152 5152
24,0	Amerício-243 953

Tabela 7: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas IAEA e JEF 2.2.

IAEA e JEF2.2	
DRAP	Nuclídeo
$>3,6 \times 10^6$	Érbio-167
3935,0	Érbio-166
309,6	Európio-152
111,2	Disprósio-164
101,5	Disprósio-165
93,8	Telúrio-127m
80,2	Disprósio-162
77,1	Disprósio-163

Tabela 8: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas IAEA e JEFF 3.1.

IAEA e JEFF3.1	
DRAP	Nuclídeo
$>3,8 \times 10^5$	Érbio-167
1338,1	Érbio-166
189,4	Disprósio-164
185,1	Disprósio-165
115,0	Disprósio-163
90,8	Disprósio-162
82,6	Disprósio-160
81,4	Telúrio-127m
55,2	Disprósio-161

Tabela 9: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas ENDF B-VII.1 e JENDL 3.2.

ENDFB-VII.1 e JENDL3.2	
DRAP	Nuclídeo
100,0	Érbio -167
86,8	Érbio -166
76,9	Disprósio -160
62,0	Amerício-242
61,8	Argônio109
54,0	Európio -152
51,9	Cúrio-242
51,8	Cúrio-242

Tabela 10: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas ENDF B-VII.1 e JEF 2.2.

ENDFB-VII.1 e JEF2.2	
DRAP	Nuclídeo
329,3	Európio -152
129,4	Érbio -166
110,6	Disprósio -164
105,9	Telúrio -127m
100,8	Disprósio -165
99,1	Érbio -167
79,7	Disprósio -162
76,5	Disprósio -163
56,6	Amerício-242

Tabela 11: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas ENDF B-VII.1 e JEFF 3.1.

ENDFB-VII.1 e JEFF3.1	
DRAP	Nuclídeo
337,0	Érbio -167
195,3	Disprósio -164
186,2	Érbio -166
172,9	Disprósio -165
113,9	Disprósio -163
92,8	Telúrio -127m
89,5	Disprósio -162
74,4	Disprósio -160
53,3	Disprósio -161

Tabela 12: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas JENDL 3.2 e JEF 2.2.

JENDL3.2 e JEF2.2	
DRAP	Nuclídeo
$>1,9 \times 10^6$	Érbio -167
1632,3	Érbio -166
308,7	Európio -152
131,1	Disprósio -165
130,7	Telúrio -127m
115,4	Disprósio -164
56,3	Disprósio -163

Tabela 13: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas JENDL 3.2 e JEFF 3.1.

JENDL3.2 e JEFF3.1	
DRAP	Nuclídeo
$>1,9 \times 10^5$	Érbio -167
835,1	Érbio -166
161,9	Disprósio -164
154,1	Disprósio-165
115,9	Telúrio -127m
94,8	Disprósio -163
73,3	Disprósio -162
53,6	Disprósio -161

Tabela 14: Desvio relativo absoluto percentual entre as bibliotecas JEF 2.2 e JEFF 3.1.

JEF2.2 e JEFF3.1	
DRAP	Nuclídeo
119,5	Érbio-167
103,1	Disprósio-164
97,3	Érbio-166
81,9	Disprósio -165
80,3	Disprósio -162
78,7	Disprósio -163
75,4	Európio -152
72,3	Disprósio -161
62,9	Disprósio -160

CAPÍTULO 5

5. CONCLUSÃO

Nesta dissertação foi simulada a queima de combustível de um elemento combustível típico de um reator de pesquisa enriquecido em 20% e composto de UAl_xAl . Para isso foi utilizado o conhecido código de cálculo de célula WIMSD-5B. O WIMSD-5B é um código determinístico, que se baseia na teoria de transporte para calcular o fluxo como uma função da energia e posição na célula, realizando cálculo para diferentes geometrias, fornecendo parâmetros físicos necessários ao desenvolvimento de projetos de reatores nucleares de diversos tipos. Nas simulações utilizadas cinco bibliotecas de dados nucleares avaliados, quais sejam: IAEA, ENDFB-VII.1, JENDL3.2, JEFF3.1 e JEF2.2, para 69 grupos de energia e formatadas pelo WLUP, WIMS Library Update Project.

Nas simulações o código WIMSD-5B forneceu as concentrações de 78 nuclídeos e o fator de multiplicação infinito, bem como os seguintes parâmetros nucleares condensados para dois grupos de energia: coeficientes de difusão, D_g ; seção de choque de absorção, Σ_{ag} ; seção de choque de remoção, Σ_{rg} ; e número médio de nêutrons de fissão multiplicado pela seção de choque de fissão, $v\Sigma_{fg}$. Todos variando em função da queima, durante 400 dias.

Foi observado que na maioria dos casos as concentrações de nuclídeos apresentaram praticamente o mesmo resultado independentemente da biblioteca de dados nucleares utilizada. O mesmo se conclui para a variação do fator de multiplicação infinito e para o parâmetro $v\Sigma_{fg}$, nos dois grupos de energia.

Recomenda-se para trabalhos futuros utilizar as bibliotecas de dados nucleares avaliados para 192 grupos de energia formatados pelo WLUP: IAEAGX, ENDFB-VII.1GX, JENDL3.2GX, JEFF3.1GX e JEF2.2GX.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGHINA, L.O.B. **Relatório R2. ARGONAUTA.** IEN, Rio de Janeiro, 2011.

ASKEW, J. R.; MACDOUGALL, J. D. **WIMS-Status Report**, AEEW-M 627, Atomic Energy Establishment of Winfrith, 1966.

BARCLAY, F. R. **An Analysis of Uranium Metal-Graphite Systems Using the Multi-Group Code WIMS**, AEEW-R 473, Atomic Energy Establishment of Winfrith, 1966.

CACUCI, D. G., **Handbook of Nuclear Engineering**, Volume 1, Springer, 2010.

CLARO, L. H., Ono, S., Nascimento, J. A., Vieira, W. J. Caldeira, A. D., & Dias, A. F. **Estudo de Modelos de Células de Combustível Tipo Placa para o Cálculo Neutrônico do Núcleo de um Reator.** INAC, Santos (2005).

DUDERSSTAD, J.J. Hamilton L.J., **Nuclear Reactor Analyses**, John Wiley & Sons Inc., New York, United States of America (1976).

HERMAN, M., TRKOV, A. (2009) **ENDF-6 formats manual: data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF/B-VI and ENDF/B-VII.** Technical report BNL-90365-2009, Brookhaven National Laboratory.

INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, IAEA, **Research Reactor Core Conversion from the Use of Highly Enriched Uranium to the use of Low Enriched Uranium Fuel**, TECDOC-233-IAEA-(1980), Vienna.

INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, IAEA, **WIMS-D LIBRARY UPDATE.** Viena, 2007.

JEFF3 (2005) **The JEFF-3.0 nuclear data library.** Technical report JEFF Report 19, OECD Nuclear Energy Agency.

KEMSHELL, P. B.; HARDCASTLE, M. **Revised Transport Cross-sections for the WIMS Library**, Atomic Energy Establishment of Winfrith, AEEW-M 1782, 1980.

KULIKOWSKA, T. **Reactors Lattice Codes**, Workshop on Nuclear Data and Nuclear Reactos: Physics, Design and Safety, Trieste, 13 março a 14 de abril 2000. Disponível em: http://users.ictp.it/~pub_off/lectures/lns005/Number_1/Kulikowska_3.pdf Acesso em: 20 maio 2017.

PUSA, M. **Numerical Methods for Nuclear Fuel Burnup Calculations**. Tese D.Sc. Aalto University, Finlândia, 2013. Disponível em: <http://lib.tkk.fi/Diss/2013/isbn9789513880002/isbn9789513880002.pdf> Acesso em: 20 maio 2017.

REUSS, P. **Neutron Physics**. EDP Sciences, França (2008).

ROTH, M. J.; MACDOUGALL, J. D.; KEMSHELL, P.B. **The Preparation of Input Data for WIMS**, AEEW-R 538, Atomic Energy Establishment of Winfrith, 1967.

SHIBATA, K., HASEGAWA, A., IWAMOTO, O., et al (2002a) **JENDL-3.2 covariance file**. J. Nucl Sci. Technol (2):40–43.

SILVA, C.A.M. **Desenvolvimento de uma Metodologia para Simulação de Reatores Refrigerados a Gás com Propósito de Transmutação**. UFMG, Belo Horizonte, 2009.

STACEY, W. M., **Nuclear Reactor Physics**, 2o Edição, Weinheim: Wiley-VCH, 2007.

APÊNDICE I

Neste apêndice são descritos os itens numerados presentes na Figura 12, que ilustra as transições de decaimento e queima de actinídeos configurados na biblioteca WIMSD-IAEA.

- (1) Captura direta no Cm-243 produzindo Cm-244.
- (2) Captura direta no Cm-242 produzindo Cm-243.
- (3) O decaimento beta de Am-242 produz o Cm-242. A razão de ramificação ($B_{Cm2} = 82,7\%$) é explicada por um rendimento efetivo (reduzido) pela produção de Am-242, que é tratado como um produto de fissão (isto é, não tem seção de choque de fissão). O ramo de emissão de pósitrons que produz Pu-242 é ignorado.
- (4) Am-242m decai por transição isomérica para Am-242. Infelizmente, o conceito de uma concentração reduzida de Am-242 não pode ser implementado para produção por decaimento de transição isomérica de Am-242m porque tal rendimento por decaimento não pode ser especificado nas bibliotecas do WIMSD. Veja a discussão sobre a produção de Am-242 por captura em Am-241.
- (5) A captura no Am-241 resulta no Am-242m com uma razão de ramificação B_{Am2} e é dependente do espectro. Os cálculos baseados nos dados ENDF/B-VI Rev. 5 produzem valores que variam de 0,132 para o benchmark de reciclagem de plutônio a 0,109 para o benchmark do bapl2 (Bettis Atomic Power Laboratory, Westinghouse, EUA). Um valor para $B_{Am2} = 0,12$ é considerado (como na biblioteca WIMSD de 1986) e aproxima-se ao benchmark DIMPLE-S01, do laboratório do “Atomic Energy Establishment” (Winfrith), Reino Unido.
- (6) O Am-242 reduzido é produzido a partir da captura no Am-241. Uma vez que apenas um nuclídeo pode ser especificado como o produto de captura (Am-242m conforme o item anterior), o Am-242 é tratado como um produto de fissão com um rendimento proporcional à relação de captura para fissão (c/f). Infelizmente, a relação depende fortemente do espectro de nêutrons. Os cálculos baseados nos dados ENDF/B-VI Rev. 5 produzem relações c/f que variam de 42 para o benchmark de reciclagem de plutônio a 124 para o benchmark bapl2. Foi adotado um valor de c/f = 92, que corresponde aproximadamente ao benchmark DIMPLE-S01. A expressão para o rendimento reduzido de Am-242 é dada por:

$$(c/f) (1 - B_{Am2}) B_{Cm2}.$$

A fissão no Am-241 é predominantemente uma reação de limiar com uma pequena contribuição sub-limiar, e a fissão no Am-241 não é um contribuinte importante para a reatividade. A seção de choque de fissão do Am-241 nas bibliotecas WIMSD é forçada a ser proporcional à seção de choque de absorção (normalizada para conservar a relação c/f selecionada) de modo a fazer o rendimento de Am-242g exato. Assim, o rendimento efetivo do Am-242 reduzido é de 67 átomos por fissão, com base nos mesmos dados para B_{Cm2} e B_{Am2} como para os itens (3) e (5), respectivamente.

- (7) Desintegração de Am-241 por emissão alfa para o Np-237.
- (8) Cm-244 decai por emissão alfa para o Pu-240.
- (9) Cm-243 decai por emissão alfa para o Pu-239.
- (10) Cm-242 decai por emissão alfa para o Pu-238.
- (11) Pu-241 decai por emissão beta para o Am-241.
- (12) Captura no Np-239: Np-240 resultante é assumido decair instantaneamente pela emissão beta para o Pu-240.
- (13) Np-239 decai por emissão beta para o Pu-239.
- (14) Captura no Np-237: o Np-238 resultante é assumido decair instantaneamente pela emissão beta para o Pu-238.
- (15) Pu-238 decai por emissão alfa para o U-234.
- (16) Captura no U-238: o U-239 resultante é assumido decair instantaneamente pela emissão beta para o Np-239.
- (17) Produção de U-237 a partir da reação (n, 2n) do U-238: é definido um produto de pseudo-fissão (ID = 4927), que se desintegra instantaneamente em U-237. O rendimento é igual à razão de reações (n, 2n)/(n, f) de U-238, e é sensível à forma detalhada do espectro e portanto difícil de determinar. A contribuição da reação acima de 10 MeV é significativa. O rendimento por fissão (n, 2n) / (n, f) = 0,06 foi adotado. O pseudo produto de fissão decai instantaneamente em U-237.
- (18) Presume-se que o produto de captura do Pa-233 decai instantaneamente para U-234.
- (19) O U-237 decai por emissão beta para o Np-237.

- (20) A cadeia de captura de U-232 para U-238 é representada explicitamente.
- (21) A produção de U-232 a partir da reação $(n, 2n)$ em U-233 é representada por um produto de pseudo-fissão (ID = 4927), que decai instantaneamente para U-232. O rendimento é igual à razão de $(n, 2n)/(n, f)$.
- (22) A produção de U-232, envolve a introdução do produto de fissão Pa-231 (isto é, a seção de choque de fissão é eliminada do conjunto de seção de choque). O rendimento de fissão é igual à razão de reações $(n, 2n) / (n, f)$ de Th-232, e o produto de captura de Pa-231 é assumido como decaindo instantaneamente para U-232.
- (23) Presume-se que o produto da captura no Th-232 decaia instantaneamente para o Pa-233.

APÊNDICE II

Neste apêndice são apresentadas informações adicionais para cada um dos 14 itens listados na Tabela 2 que descreve o conteúdo da biblioteca ENDF/B-VII.1.

1. A sub-biblioteca fotonuclear foi transportada sem alteração a partir de ENDF/B-VII.0. Contém secções de choque avaliadas para 163 materiais (todos isótopos), principalmente até 140 MeV. A sub-biblioteca foi fornecida pelo Laboratório Nacional de Los Alamos (LANL) e é largamente baseada na colaboração coordenada pela IAEA concluída em 2000.
2. A sub-biblioteca foto-atômica foi adquirida a partir de ENDF/B-VII.0 = ENDF/B-VI.8. Ela contém dados para fótons de 10 eV até 100 GeV interagindo com átomos para 100 materiais (todos elementos). A sub-biblioteca foi fornecida pelo Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL).
3. A sub-biblioteca de dados de decaimento foi reavaliada e consideravelmente melhorada pelo Laboratório Nacional de Brookhaven (BNL).
4. Os rendimentos de fissão espontânea foram retirados de ENDF/B-VII.0 = ENDF/B-VI.8. Os dados foram fornecidos pela LANL.
5. A sub-biblioteca de relaxamento atômico foi tomada a partir de ENDF/B-VII.0 = ENDF / B-VI.8. Ela contém dados para 100 materiais (todos elementos) fornecidos pela LLNL.
6. A sub-biblioteca de reação de nêutrons representa o coração da biblioteca ENDF/B-VII.1. A sub-biblioteca foi atualizada e estendida, contém 423 materiais, incluindo 422 isotópicos e 1 avaliação elementar. No total, 234 materiais foram alterados em ENDF/B-VII.1 em comparação com ENDF/B-VII.0.
7. Os rendimentos de nêutrons de fissão foram reavaliados para ^{239}Pu (rápido e 14 MeV) por Los Alamos; Outros foram retirados do ENDF/B-VII.0 = ENDF/B-VI.8, tendo sido fornecidos pela LANL.
8. A sub-biblioteca de espalhamento de neutrons térmicos foi transportada sem alteração a partir de ENDF/B-VII.0. Contém dados da lei de espalhamento térmico, amplamente fornecidos por LANL, com a adição de SiO_2 em ENDF/B-VII.1 de ORNL.
9. A sub-biblioteca de padrões de seção de choque de nêutrons foi transferida de ENDF/B-VII.0 inalterada. Por conseguinte, tal como para VII.0, as seções de choque

normalizadas VII.0 foram completamente adotadas pela sub-biblioteca de reção de neutrons VII.1 exceto para a secção de choque térmica para ^{235}U (n, f) onde ocorre uma ligeira diferença para satisfazer os ensaios de dados térmicos, e algumas diferenças muito pequenas para ^{235}U (n, f) e ^{238}U (n, γ) na região keV-MeV.

10. A sub-biblioteca electro-atômica foi adquirida a partir de ENDF/B-VII.0 = ENDF/B-VI.8. Ela contém dados para 100 materiais (todos elementos) fornecidos pela LLNL.
11. As reções induzidas por protons foram transportadas de ENDF/B-VII.0 com apenas pequenas correções. Estes foram fornecidos pelo LANL e os dados foram principalmente para 150 MeV.
12. As reações induzidas por deutério foram fornecidas por LANL, mantidas inalteradas a partir de ENDF / B-VII.0. Esta sub-biblioteca contém 5 avaliações.
13. As reções induzidas por trítio foram fornecidas por LANL, mantidas inalteradas a partir de ENDF/B-VII.0. Esta sub-biblioteca contém 3 avaliações.
14. As reações induzidas com ^3He foram fornecidas por LANL, mantidas inalteradas de ENDF/B-VII.0. Esta sub-biblioteca contém 2 avaliações.

APÊNDICE III

Neste apêndice é apresentado o cálculo das espessuras e das concentrações dos nuclídeos da célula equivalente definitiva, célula Mee, conforme a Figura 20.

Cálculo das espessuras da célula Mee

Nessa nova célula, a soma das áreas 1, 2 e 3 (Figura 20) equipara-se à metade da área Ae, sendo indicada como Aee. A área da região 4 é correspondente à área do retângulo Be. A proporção entre essas novas áreas e a macrocélula é mantida pela Equação (19).

$$\frac{A_{ee}}{B_e} = \frac{A}{B} \quad (19)$$

Região 1: $\frac{1}{2}$ espessura do miolo = L_M

$$\frac{0,051}{2} = 0,0255 \text{ cm}.$$

Região 2: revestimento = L_{RC}

$$(\text{Espessura da placa} - \text{espessura do miolo})/2$$

$$\frac{0,127 - 0,051}{2} = 0,038 \text{ cm}.$$

Região 3: $\frac{1}{2}$ canal de água = L_{RFM}

$$\frac{0,223}{2} = 0,1115 \text{ cm}.$$

Região 4: bordas inertes de Al e excesso de água = L_{REX}

Da Equação (19) tem-se a Equação (20):

$$A_{ee} = C_N \times L_{Aee} \quad (20)$$

Onde:

A_{ee} : Área equivalente à área A da macrocélula M.

B_e : Área equivalente á área B da macrocélula M.

C_N : Comprimento normalizador, indicado pela metade do comprimento do miolo da placa.

L_{Aee} : Espessura do retângulo Aee: 1/2 espessura do miolo + revestimento + 1/2 canal de água.

$$L_{Aee} = (0,0255 + 0,038 + 0,1115) = 0,175 \text{ cm},$$

$$A_{ee} = \frac{6,275}{2} \times 0,175 = 0,54906 \text{ cm}^2,$$

$$B_e = \frac{B}{A} \times A_{ee},$$

$$B_e = \frac{11,5425}{50,8275} \times 0,54906 = 0,12468 \text{ cm}^2,$$

$$L_{Be} = \frac{B_e}{C_N},$$

$$L_{Be} = \frac{0,12468}{3,1375} = 0,0397 \text{ cm},$$

L_{Be} : Espessura do retângulo B_e .

Cálculo das concentrações atômicas

A concentração atômica é dada pela Equação (21):

$$N_{i,R} = \frac{m_{iR} \times N_A}{V_R \times A_i}, \quad (21)$$

onde:

$N_{i,R}$: Número de átomos do elemento ou isótopo i por unidade de volume na região R ;

m_{iR} : Massa do elemento ou isótopo contido em V_R ;

N_A : Número de Avogadro;

V_R : Volume da região R ;

A_i : Massa atômica do elemento ou isótopo i .

Em alguns casos a densidade do material é aplicada diretamente na Equação (21), sendo escrita conforme a Equação (22):

$$N_{i,R} = \frac{\rho_i \times N_A}{A_i}, \quad (22)$$

onde,

ρ_i : Densidade do elemento i .

Região I: miolo - UAl_x-Al

$$\text{Volume}_{\text{Miolo}} = 0,051 \times 6,275 \times 60 = 19,2015 \text{ cm}^3,$$

m_U – massa total de urânio,

m_{235} – massa de U₂₃₅,

m_{238} – massa de U₂₃₈,

m_{Al} – massa de Al,

$$N_{235,1} = \frac{16,95652 \times 0,60225}{19,2015 \times 235,0439} = 2,26271 \times 10^{-2} \frac{\text{átomos}}{\text{barn}} \cdot \text{cm},$$

$$m_U = \frac{16,95652}{0,20} = 84,7826 \text{ g},$$

$$m_8 = 0,8 \times 84,7826 = 67,82608 \text{ g},$$

$$N_{U_{238},1} = \frac{67,82608 \times 0,60225}{19,2015 \times 238,0508} = 8,93652 \times 10^{-3} \frac{\text{átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm}.$$

Como já apresentado na Tabela 3, tem-se 72 w/o de U em UAl_x - Al, resultando em:

$$m_{mistura} = \frac{84,7826 \times 100}{72} = 117,753 \text{ g} .$$

Assim, tem-se que:

$$m_{Al} = 117,753 - 84,7826 = 32,9704 \text{ g} ,$$

$$N_{Al,1} = \frac{32,9704 \times 0,60225}{19,2015 \times 26,9815} = 3,83265 \times 10^{-2} \frac{\text{átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm} .$$

Região 2: Revestimento (Al) -20°C

$$\rho_{Al} = 2,7 \text{ g/cm}^3 ,$$

$$N_{Al,2} = \frac{2,7 \times 0,60225}{26,9815} = 6,02661 \times \frac{10^{-2} \text{ átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm} .$$

Região 3: Moderador e refrigerante - 20°C

$$N_{H_2O,3} = \frac{0,9982 \times 0,6225}{18,0152} = 3,33695 \times \frac{10^{-2} \text{ átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm} ,$$

$$N_{H,3} = 2 \times N_{H_2O} = 6,6739 \times \frac{10^{-2} \text{ átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm} ,$$

$$N_{O,3} = N_{H_2O,3} = 3,33695 \times \frac{10^{-2} \text{ átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm} .$$

Região 4: Região extra - Bordas inertes de Al e excesso de água

$$\text{Área de Al} = (0,175 \times 0,127 \times 23 \times 2) + (0,475 \times 8,1) = 8,81958 \text{ cm}^2$$

$$\text{Área de água} = \text{Área B} - \text{Área de Al} = 11,5425 - 8,81958 = 2,72292 \text{ cm}^2,$$

$$N_{\text{Al},4} = \frac{2,7 \times 0,60225}{26,9815} \times \frac{8,81958}{11,5425} = 4,60492 \times 10^{-2} \times \frac{\text{átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm},$$

$$N_{\text{H}_2\text{O},4} = \frac{0,9982 * 0,6225}{18,0152} \times \frac{2,72292}{11,5425} = 7,87207 \times \frac{10^{-3} \text{ átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm},$$

$$N_{\text{H},4} = 2 \times N_{\text{H}_2\text{O}} = 1,57441 \times \frac{10^{-2} \text{ átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm},$$

$$N_{\text{O},4} = N_{\text{H}_2\text{O}} = 7,87207 \times \frac{10^{-3} \text{ átomos}}{\text{barn}} \times \text{cm}.$$