

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

CÁLCULO DOS FATORES DE DANCOFF COM ABSORÇÃO PARCIAL DE NÊUTRONS
EM GEOMETRIA CLUSTER PELO MÉTODO DIRETO

por

Letícia Jenisch Rodrigues

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, abril de 2007.

CÁLCULO DOS FATORES DE DANCOFF COM ABSORÇÃO PARCIAL DE NÊUTRONS
EM GEOMETRIA CLUSTER PELO MÉTODO DIRETO

por

Letícia Jenisch Rodrigues

Licenciada em Física

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Túllio Menna Barreto de Vilhena

Co-orientador: Prof. Dr. Sergio de Queiroz Bogado Leite (CNEN/RJ)

Aprovada por:

Prof. Dr. Luiz Paulo Luna de Oliveira (UNISINOS/RS)

Prof. Dr. Bardo Ernest Josef Bodmann (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Volnei Borges (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Flávio José Lorini
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, abril de 2007.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus e aos meus pais pelas lições que só se aprende no coração de um lar. Serei eternamente grata aos meus demais familiares, mestres e amigos pelo apoio e compreensão.

Gostaria de agradecer também à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, CAPES, pelo suporte financeiro, e ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, representado por seus funcionários e corpo docente.

RESUMO

Por muitos anos, vários métodos têm sido propostos para a obtenção dos fatores de Dancoff para materiais perfeitamente e parcialmente absorvedores de nêutrons em meios heterogêneos. No presente trabalho, esse fator é definido como a probabilidade que um nêutron emitido a partir de uma superfície de um elemento combustível irá entrar em outro elemento combustível sem sofrer nenhuma colisão no moderador ou no revestimento.

A absorção ressonante em arranjos compactos é fortemente influenciada por esse fator, e nos casos mais gerais de células irregulares, os modelos utilizados ainda apresentam diferenças que refletem em cálculos de criticalidade, taxas de conversão e queima.

O código WIMS, um dos mais utilizados códigos de gerenciamento de núcleo de reatores nucleares, possuía originalmente uma sub-rotina PIJ utilizada para calcular matrizes de colisão e fatores de Dancoff, para materiais perfeitamente absorvedores (*Black Dancoff factors*), para células combustíveis, em um determinado grupo de energia utilizando a definição em termos das probabilidades de colisão. O cálculo dessas probabilidades era baseado nas distâncias percorridas pelos nêutrons entre regiões da célula. A malha de integração, sobre a qual as integrações duplas das funções de Bickley eram calculadas por regra trapezoidal simples, era composta por conjuntos de linhas paralelas, igualmente espaçadas radialmente, traçados para cada um dos ângulos azimutais igualmente incrementados em relação a uma direção de referência.

Embora rápido, o esquema de cálculo era ineficiente. A malha fixa era independente do tamanho das regiões que compunham célula, de maneira que regiões muito pequenas, muitas vezes eram atravessadas por poucos traços. Uma modificação nessa sub-rotina, atualmente chamada de PIJM, foi implementada de maneira que cada região da célula tivesse uma malha própria, evitando o excesso de traços em algumas regiões e a falta de traços em outras. Outra melhoria foi a modificação da técnica de integração, isto é, as integrais radiais passaram a ser calculadas por quadraturas gaussianas e as angulares por regra trapezoidal estendida, resultando em melhorias significativas nos fatores de Dancoff comprovadas por comparações com resultados precisos existentes na literatura em situações simples. Entretanto, os fatores assim calculados consideravam as regiões combustíveis formadas por materiais perfeitamente absorvedores.

O objetivo deste trabalho é obter os fatores de Dancoff, com absorção parcial do combustível, em células cilíndricas a partir de sua definição alternativa, ou seja, a correção na probabilidade de escape do combustível devido às demais varetas combustíveis do meio. Através da modificação da sub-rotina PIJM determina-se esses fatores para cinco posições diferentes de varetas, utilizando-se a célula canadense CANDU-37, obtendo-se resultados satisfatórios em relação aos encontrados na literatura especializada.

ABSTRACT

DANCOFF FACTORS WITH PARTIAL NEUTRONS ABSORPTION IN CLUSTER GEOMETRY BY THE DIRECT METHOD

Accurate analysis of resonance absorption in heterogeneous systems is essential in problems like criticality, breeding ratios and fuel depletion calculations. In compact arrays of fuel rods, resonance absorption is strongly affected by the Dancoff factor, defined in this study as the probability that a neutron emitted from the surface of a fuel element, enters another fuel element without any collision in the moderator or cladding. In fact, in the most practical cases of irregular cells, it is observed that inaccuracies in computing both Grey and Black Dancoff factors, i.e. for partially and perfectly absorbing fuel rods, can lead to considerable errors in the calculated values of such integral quantities. For this reason, much effort has been made in the past decades to further improve the models for calculating Dancoff factors, a task that has been accomplished in connection with the development of faster computers.

In the WIMS code, Black Dancoff factors based on the above mentioned collision probability definition are computed in cluster geometry, for each one of the symmetrically distinct fuel pin positions in the cell. Sets of equally-spaced parallel lines are drawn in subroutine PIJ, at a number of discrete equally-incremented azimuthal angles, covering the whole system and forming a mesh over which the in-plane integrations of the Bickley functions are carried out by simple trapezoidal rule, leading to the first-flight collision matrices. Although fast, the method in PIJ is inefficient, since the constructed mesh does not depend on the system details, so that regions of small relative volumes are crossed out by relatively few lines, which affects the convergence of the calculated probabilities. A new routine (PIJM) was then created to incorporate a more efficient integration scheme considering each system region individually, minimizing convergence problems and reducing the number of neutron track lines required in the in-plane integrations for any given accuracy. In this routine, the radial integrations are performed by Gauss' formula whereas the angular ones are obtained by extended trapezoidal rule.

In the present work, PIJM is extended to compute Grey Dancoff factors by the collision probability definition, in two-dimensional cylindrical cells in cluster geometry. The

effectiveness of the method is assessed by comparing Grey Dancoff factors as calculated by PIJM, with those available in the literature by the Monte Carlo method, for the irregular geometries of the Canadian CANDU37 assembly. Dancoff factors at five symmetrically distinct fuel pin positions are found in very good agreement with the literature results.

Índice

1 Introdução.	1
1.1 Revisão Bibliográfica.	3
2 Absorção Ressonante em Sistemas Heterogêneos.	10
2.1 Método das Probabilidades de Colisão.	10
2.1.1 Postulado da fonte planar.	12
2.1.2 Relação geral de reciprocidade.	12
2.1.3 Aproximação NR.	12
3 O Fator de Dancoff.	14
3.1 <i>Black Dancoff factors</i> – materiais perfeitamente absorvedores.	15
3.2 <i>Grey Dancoff factors</i> – materiais parcialmente absorvedores.	18
4 O Código WIMS e a sub-rotina PIJM.	20
4.1 A Sub-rotina PIJM.	21
4.2 As matrizes de probabilidade calculadas por PIJM.	23
5 O Método Utilizado.	26
5.1 Definição do problema.	26
5.2 Determinando os fatores de Dancoff para materiais parcialmente absorvedores.	27
5.2.1 Método de Cálculo das Probabilidades de Colisão.	29
5.3 Célula Utilizada.	33
6 Resultados.	35
7 Conclusões e Perspectivas.	40
Referências Bibliográficas.	42
Apêndices.	45
I Arquivo de entrada de dados para CANDU-37.	45
II Definições e conceitos importantes.	47
II.1 O nêutron como uma partícula pontual.	47

II.2 Seções de choque.	48
II.2.1 Seções de choque microscópicas.	48
II.2.2 Seções de choque macroscópicas.	49
II.3 O efeito Doppler.	49
II.4 Fator de multiplicação efetivo – κ	51
II.4.1 Modelo simples da cinética das reações em cadeia.	54
II.5 Tipos de sistemas.	56
II.5.1 Homogêneo.	56
II.5.2 Quase-homogêneo.	57
II.5.3 Heterogêneo.	57
III Um pouco de história.	58
IV Os reatores do tipo PWR.	62
VI.1 Fluido Refrigerante.	63
VI.2 Moderador.	64
VI.3 Combustível.	64
IV.4 Sistemas de Controle – Segurança.	65

Lista de Símbolos

Caracteres Arábicos

A_s	Área	[cm ²]
A	Número de massa	
C	Fator de Dancoff	
D_n	Densidade volumétrica	[núm. de isótopos/cm ³]
E_c	Energia cinética do nêutron	[J]
E_γ	Energia cinética da radiação gama	[MeV]
f	Fator de utilização térmica	
h	Constante de Plank	[Js]
$H(t)$	Taxa de produção de nêutrons	[nêutrons/s]
I	Intensidade da corrente de nêutrons	
K_i	Função de Bickley	
l	Tempo de vida do nêutron	[s]
$L(t)$	Taxa de perda de nêutrons	[nêutrons/s]
n	Nêutron	
N	Número de nêutrons	
p	Próton	
p_n	<i>Momentum</i> linear	[kgm/s]
P	Probabilidades	
$P_{a \rightarrow b}$	Probabilidade de transmissão entre regiões	
r	Distância ou raio	[cm]
\bar{r}	Comprimento médio da corda	[cm]
R	Região	
$RS_{a \rightarrow m}$	Probabilidade de transmissão entre região e superfície	

S	Superfície	
$SR_{m \rightarrow a}$	Probabilidade de transmissão entre superfície e região	
$SS_{m \rightarrow n}$	Probabilidade de transmissão entre superfície e superfície	
TC	Taxa de colisão	[nêutrons/s]
V	Volume	[cm ³]
\vec{V}_{nucleo}	Velocidade do núcleo	[m/s]
${}_{ZZ}^{AA}X$	Elemento químico, X, com número de prótons igual a ZZ e número de massa igual a AA	
Z	Número de prótons	

Caracteres Gregos

α	Energia fracional mínima	
α_{mF}	Energia fracional mínima do moderador da região F	
α_a	Energia fracional mínima do absorvedor da região F	
α_{mM}	Energia fracional mínima do moderador da região M	
ε	Razão entre o número provável de nêutrons rápidos provenientes de fissão rápida e térmica e o número provável de nêutrons rápidos provenientes de fissão térmica	
ζ	Nêutrons gerados num ciclo	
η	Número de nêutrons produzidos no combustível	
κ	Fator de multiplicação efetivo	
λ	Comprimento de onda reduzido	[cm]
λ	Livre caminho médio	[cm]
κ	Fator de multiplicação efetivo	
σ	Seção de choque microscópica	[b]
τ	Espessura óptica	
v_r	Módulo da velocidade relativa de aproximação	[m/s]
$\vec{v}_{nêutron}$	Velocidade do nêutron	[m/s]
ϕ	Fluxo médio no volume	
Σ	Seção de choque macroscópica	[cm ⁻¹]
\sum_j	Operador matemático representando somatório de j elementos	

Índice de Figuras

1.1	Notações usadas para o cálculo dos fatores de Dancoff em uma malha de varetas [Carlvik, 1967].	5
1.2	Células combustíveis do tipo CANDU-37 (a) e CANFLEX (b).	6
1.3	Malhas de integração utilizadas em PIJ (a) e PIJM (b).	8
2.1	Esquema com as regiões F e M.	11
3.1	Esquema simplificado mostrando a projeção da trajetória do nêutron no plano xy e dois corpos negros i e j	15
4.1	Célula cilíndrica (a) e célula quadrada (b).	20
4.2	Malha de integração utilizada em PIJ [Bogado, 2000].	21
4.3	Para cada direção radial definida por θ_j , um conjunto de linhas paralelas é desenhado perpendicularmente a essa distando x_i do centro da célula ou do anel, com x_i as quadraturas da integração radial [Bogado, 2000].	22
4.4	Seção transversal de uma célula mostrando as regiões i e j e as superfícies m e n [Anderson, 1973].	24
5.1	Exemplo de uma célula cilíndrica contendo duas varetas e quatorze regiões [Bogado, 2000].	27
5.2	Célula cilíndrica em geometria cluster [Bogado et al., 2004b].	28
5.3	Fluxograma simplificado da sub-rotina PIJM para caracterizar as modificações e o processo de determinação dos fatores de Dancoff com absorção parcial.	31
5.4	Fluxograma simplificado para caracterizar os testes de consistência impostos pela sub-rotina R3.	32
5.5	Seção transversal da célula combustível canadense CANDU-37.	33
6.1	Fatores de Dancoff com absorção parcial em função da seção de choque macroscópica total do moderador, assumindo que as seções de choque do combustível e do revestimento são, respectivamente, $0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$	37

6.2	Fatores de Dancoff com absorção parcial em função da seção de choque macroscópica total do moderador, assumindo que as seções de choque do combustível e do revestimento são, respectivamente, $0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Kim e Cho, 1999].	37
6.3	Fatores de Dancoff, com absorção parcial, em função da seção de choque macroscópica total do combustível, assumindo que as seções de choque do moderador e do revestimento são, respectivamente, $0,3 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$	38
6.4	Fatores de Dancoff cinza em função da seção de choque macroscópica total do combustível, assumindo que as seções de choque do moderador e do revestimento são, respectivamente, $0,3 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Kim e Cho, 1999].	38
II.1	Esquema “hierárquico” das seções de choque microscópicas.	48
II.2	Movimentos do nêutron e do núcleo. [Lamarsh, 1966].	50
II.3	Ressonâncias na seção de choque Σ em função da energia do nêutron incidente [Lamarsh, 1966].	50
II.4	Achatamento Doppler devido ao aumento da temperatura dos núcleos absorvedores [Barros, 2007].	51
II.5	Tendência que os fragmentos de fissão têm de possuírem um número excessivo de nêutrons [Eisberg, 1979].	52
II.6	Espectro de massa dos fragmentos produzidos na fissão do $^{92}\text{U}^{233}$, $^{92}\text{U}^{235}$ e $^{94}\text{Pu}^{239}$ quando induzida por nêutrons de baixa energia [Eisberg, p. 1979].	52
II.7	Ciclo do nêutron [Barros, 2007].	53
II.8	Número de nêutrons X tempo [Barros, 2007].	56
II.9	Dois redes heterogêneas típicas: quadrada (a) e hexagonal (b) com suas células unitárias [Lamarsh, 1966].	57
II.10	Célula cilíndrica equivalente [Lamarsh, 1966].	57
III.1	<i>Shippingport Atomic Power Station</i> em Shippingport, Pensilvânia (EUA) [US DOE, 2007].	59
III.2	Vaso de pressão do reator de Shippingport [ESVA, 2007].	60
IV.1	Esquema simplificado do funcionamento de um reator do tipo PWR, [Eletronuclear, 2007].	63
IV.2	PWR <i>fuel bundle</i> , [How Stuff Works, 2007].	65
IV.3	Vaso do reator, [How Stuff Works, 2007].	66

Índice de Tabelas

5.1	Principais características da célula combustível utilizada.	34
6.1	Valores dos fatores de Dancoff, com absorção parcial, encontrados para cada posição em função da variação da seção de choque total do moderador, Σ_M , para células do tipo CANDU37.	36
6.2	Valores dos <i>Black Dancoff factors</i> correspondentes para cada posição em função da variação da seção de choque total do combustível obtidos neste trabalho e pelo Método de Monte Carlo [Kim e Cho, 1999], e diferenças relativas.	39
	
6.3	Valores dos <i>Black Dancoff factors</i> correspondentes para cada posição em função da variação da seção de choque total do combustível obtidos neste trabalho e em [Bogado, 2004b], e diferenças relativas	39

1 Introdução

A solução do problema energético não está em uma única forma de energia, mas no conjunto de várias alternativas que devem ser exploradas, haja vista que cada fonte de energia se ajusta a uma determinada necessidade. Usinas nucleares funcionam em áreas relativamente pequenas, não liberam gases que contribuam para o aquecimento global, e os resíduos produzidos são mantidos em depósitos, recebendo cuidados permanentes, mantendo assim os mesmos princípios de respeito ao meio ambiente que o Protocolo de Kyoto prescreve. Sendo gerada com segurança e utilizada nas aplicações adequadas, a energia nuclear tem seu papel de grande relevância no mundo, pois, em larga escala, é a que menos causa impacto ao meio ambiente.

É fato que a energia nuclear é rejeitada pelo público em geral, devido aos problemas de segurança, lixo nuclear (rejeitos radioativos) e associação à indústria bélica. Porém, os incidentes ocorridos ao longo da história da operação dos reatores, somados aos avanços tecnológicos, levaram os projetistas a buscar e implementar sistemas de segurança cada vez mais eficientes.

A avaliação de segurança de uma usina nuclear deve envolver estudos que procurem verificar parâmetros do projeto e sua compatibilidade com os sistemas de emergência, dentro das limitações tecnológicas e incerteza dos métodos disponíveis. Para tanto, são utilizados métodos numéricos para a solução de problemas de difusão e transporte de nêutrons no núcleo, os quais são frequentemente revistos a fim de aproximá-los cada vez mais das situações reais.

No Brasil, a Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN) possui um órgão responsável pelo licenciamento e inspeção de usinas e reatores de pesquisa, a Coordenação Geral de Reatores e Ciclo do Combustível (CGRC), que vem, desde 1996, desenvolvendo ferramentas independentes de avaliação de segurança das instalações nucleares sob sua responsabilidade.

O código WIMS, um dos mais utilizados códigos de gerenciamento de núcleo por tratar tanto barras combustíveis como partes maiores do núcleo do reator, já sofreu algumas

modificações propostas pela CGRC, que foram testadas e implementadas, obtendo-se resultados satisfatórios já publicados na literatura especializada. A análise desses novos resultados, em conjunto com a análise do modelo de cálculo da absorção ressonante no combustível, evidenciou a necessidade de, pelo menos, mais uma alteração.

A absorção ressonante é fortemente influenciada por um parâmetro chamado fator de Dancoff, que inicialmente corrigia a superfície efetiva das varetas combustíveis, como forma de compensar a diminuição da incidência de nêutrons na vareta pela presença de outras varetas combustíveis na célula (efeito de sombreamento), para materiais considerados absorvedores perfeitos (*Black Dancoff factors*). Vários esforços foram empenhados para a obtenção de valores cada vez mais precisos, no entanto, a hipótese de absorvedores perfeitos se distancia da realidade dentro do núcleo do reator. Seria de grande valia, então, que o código calculasse fatores de Dancoff para varetas combustíveis com absorção parcial (*Grey Dancoff factors*). Dessa forma, melhorias na obtenção desse fator se refletem em cálculos de criticalidade, taxa de conversão e queima.

Isso posto, apresenta-se o objetivo deste trabalho: obter os fatores de Dancoff com absorção parcial do combustível em células cilíndricas utilizando-se a definição alternativa do fator de Dancoff, isto é, a correção na probabilidade de escape do combustível devido às demais varetas combustíveis do meio. Como todo trabalho científico, a validação do mesmo é feita a partir de comparações com dados obtidos experimentalmente ou existentes na literatura. Nesse caso, os valores obtidos pelo método direto são comparados com aqueles encontrados pelo método probabilístico de Monte Carlo.

Visando a apresentar o embasamento teórico, o método utilizado e os resultados de maneira clara e linear, a presente dissertação encontra-se estruturada em sete capítulos, sendo este, introdutório, o primeiro. No Capítulo 2, apresenta-se o modelo teórico da absorção ressonante em sistemas heterogêneos, sendo feito no terceiro Capítulo o detalhamento do cálculo do fator de Dancoff desde sua proposição inicial.

O código WIMS e a sub-rotina PIJM são apresentados com detalhes no Capítulo 4. Nesse ponto, o problema é caracterizado e faz-se um breve histórico da rotina, evidenciando as modificações propostas ao longo do tempo. Discute-se, no Capítulo 5, a modelagem matemática sugerida para a obtenção dos fatores de Dancoff para absorvedores parciais, *Grey Dancoff factors*, utilizando a definição alternativa.

No Capítulo 6 os resultados do cálculo direto são apresentados e comparados com dados da literatura obtidos pelo Método de Monte Carlo. Finalmente, dedica-se o Capítulo 7 às conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Optou-se por acrescentar apêndice contendo algumas considerações iniciais, conceitos e definições importantes utilizados ao longo do texto, ou para um melhor entendimento do mesmo. Aqui no Brasil, os reatores utilizados em Angra 1 e 2 são do tipo PWR (*Pressurized Water Reactors*). Mesmo tratando de células combustíveis utilizadas em Usinas do Canadá e da Argentina, visto que são essas as abordadas na literatura específica existente utilizada, apresenta-se o início da história da energia nuclear no Brasil, apêndice 3, e alguns detalhes do PWR no apêndice 4. Além das informações adicionais, encontra-se no apêndice 1 o arquivo de entrada que gerou os resultados discutidos no presente trabalho.

Para motivar a realização deste trabalho, apresenta-se na seção seguinte uma revisão bibliográfica.

1.1 Revisão Bibliográfica

O primeiro método utilizado para o cálculo da absorção ressonante em meios heterogêneos separava a absorção em dois termos: um de volume (*mass absorption*) e um de superfície (*surface absorption*). O primeiro termo dependia, principalmente, da seção de choque de espalhamento associada ao átomo de urânio. Assim, a importância de se eliminar qualquer material estranho à amostra é justificada, visto que a absorção do elemento combustível como um todo é representada pela absorção da amostra. O segundo termo não é nada além de uma correção ao primeiro, contanto que o diâmetro do elemento combustível seja da ordem de poucos centímetros. As considerações feitas por Wigner, [Wigner, E. P. et al., 1955], assumem implicitamente que os núcleos devem ser, pelo menos, dessa dimensão. A absorção de superfície depende da seção de choque de espalhamento dos materiais misturados ao urânio, entretanto essa dependência é menor que aquela apresentada pela absorção de volume, diminuindo com o aumento das seções de choque de espalhamento das misturas.

Dancoff e Ginsburg [Dancoff e Ginsburg, 1944] propõem uma forma alternativa de encarar o problema. Para um arranjo de varetas muito próximas, a corrente de nêutrons entrando no combustível é reduzida comparada àquela que o faria se a vareta combustível estivesse isolada num meio moderador infinito. Essa redução deve-se ao efeito de “sombreamento” causado pelas varetas ao redor, sendo interpretado como uma redução na superfície efetiva da vareta combustível. Em seu trabalho original, Dancoff e Ginsburg derivam uma fórmula para a

correção da superfície fornecendo alguns resultados numéricos para a correção C^1 . Nesse modelo, o material do combustível é considerado um absorvedor perfeito e a correção recebe o nome de correção de Dancoff.

Em [Nordheim, 1961] um novo método para o cálculo das integrais de ressonância para sistemas homogêneos e heterogêneos é apresentado, consistindo numa solução numérica direta da integral para o fluxo médio no absorvedor, escolhendo-se entre uma das duas aproximações, “*narrow*” ou “*wide*”. Incluso, encontra-se a opção da escolha da geometria, o tratamento integral de materiais espalhadores misturados e a correção de Dancoff para absorvedores de transparência arbitrária.

Usando o método da corda para as probabilidades de escape, para um sistema homogêneo, testa uma aproximação racional para P_0 , probabilidade de escape do combustível, em função da seção de choque de escape efetiva. Para sistemas com varetas muito próximas, tem-se a necessidade de aplicar a correção proposta por Dancoff para materiais perfeitamente absorvedores em termos do comprimento de corda médio, \bar{r} , o qual é modificado dividindo-se por um fator, ou seja,

$$\bar{r}^* = \frac{r}{(1-C)} \quad (1.1)$$

Para varetas combustíveis muito finas e dispostas muito próximas umas às outras em arranjos infinitos, a probabilidade de escape do combustível também deverá ser escrita em função de C^2 . Assim,

$$P_F = P_0 \frac{1-C}{1-C(1-\sum_i^F \bar{r}P_0)} \quad (1.2)$$

Os métodos subsequentes para o cálculo da absorção por ressonância são baseados no conceito de probabilidades de colisão. Assim, um meio originalmente heterogêneo é, muitas vezes, transformado em meio homogêneo a partir de teoremas de equivalência. Nesse caso, o efeito de sombreamento também é levado em conta, contudo a interpretação é outra. A correção usada é $(1-C)$, que é a probabilidade de colisão no moderador através da interface moderador combustível para nêutrons entrando na superfície do combustível. Neste trabalho, a correção C será denominada fator de Dancoff, enquanto a correção $(1-C)$ receberá o nome de correção de Dancoff.

¹ Maiores detalhes na seção 3.1.

² Maiores detalhes na seção 3.2.

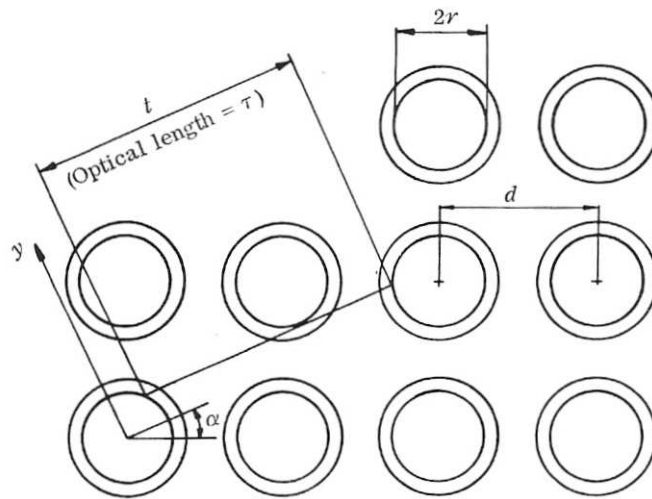


Figura 1.1 – Notações usadas para o cálculo dos fatores de Dancoff em uma malha de varetas [Carlvik, 1967].

Para absorvedores perfeitos, as duas definições são equivalentes, conforme mostra Carlvik [Carlvik, 1967]. Em seu trabalho, apresenta uma série de cálculos para o fator de Dancoff para arranjos de varetas quadrados ou hexagonais, Figura 1.1. A equação que define esse fator para absorvedores perfeitos pode ser escrita como

$$C = \frac{1}{\alpha_0} \int_0^{\alpha_0} \frac{1}{2r} d\alpha \int_{-r}^r \frac{Ki_3(\tau)}{Ki_3(0)} dy, \quad (1.3)$$

onde o ângulo α_0 vale $\pi/4$ para arranjos quadrados e $\pi/6$ para arranjos hexagonais, Ki_3 são funções de Bickley de ordem três, definidas como

$$Ki_3(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \sin^2(t) \exp\left(\frac{-x}{\sin t}\right) dt, \quad (1.4)$$

nesse caso, em função da espessura óptica, τ , e r é o raio da vareta em questão.

As integrais em α e r são calculadas usando a regra trapezoidal simples. Rotinas para determinar os fatores de Dancoff foram escritas, e o autor apresenta a sub-rotina DASQHE, pertencente ao código WIMS³. Os resultados foram utilizados para checar a fórmula aproximada de Sauer e a modificação proposta por Bonalumi, a qual apresentou resultados satisfatórios.

Os métodos descritos até agora são exatos, suas formulações estão corretas, e os erros encontrados devem-se à integração numérica. Outro fator que influencia a convergência dos valores é a aproximação usada para o cálculo da função de Bickley.

Em [Féher et al., 1994] os fatores de Dancoff são calculados para arranjos com elementos combustíveis cilíndricos e esféricos a partir do método de Monte Carlo, baseando-se

³ Maiores detalhes no capítulo 4.

na definição de probabilidades de colisão. Os elementos combustíveis possuem diâmetros e materiais de composição diferentes, parcialmente e perfeitamente absorvedores.

Os cálculos por Monte Carlo são baseados no modelo de “histórias reais” de nêutrons, isto é, o cálculo do fator de Dancoff assume um modelo físico de transporte de nêutron numa dada geometria. Nesse caso, o processo conduz a uma modificação na probabilidade de escape.

O algoritmo DANCOFF-MC, utilizado para os cálculos pelo método de Monte Carlo, calcula a probabilidade de um nêutron, emitido isotropicamente da região de combustível de um elemento em consideração, entrar na região combustível de outro elemento sem sofrer colisão no moderador ou no revestimento. Para tanto, assume-se que a fonte de nêutrons emergentes possui densidade constante em toda superfície da região combustível. São efetuados cálculos para os arranjos combustíveis do tipo CANDU-37 e CANFLEX. Os valores encontrados são comparados a outros métodos de cálculo, concluindo que os valores obtidos por Féher [Féher et al., 1994] são mais precisos.

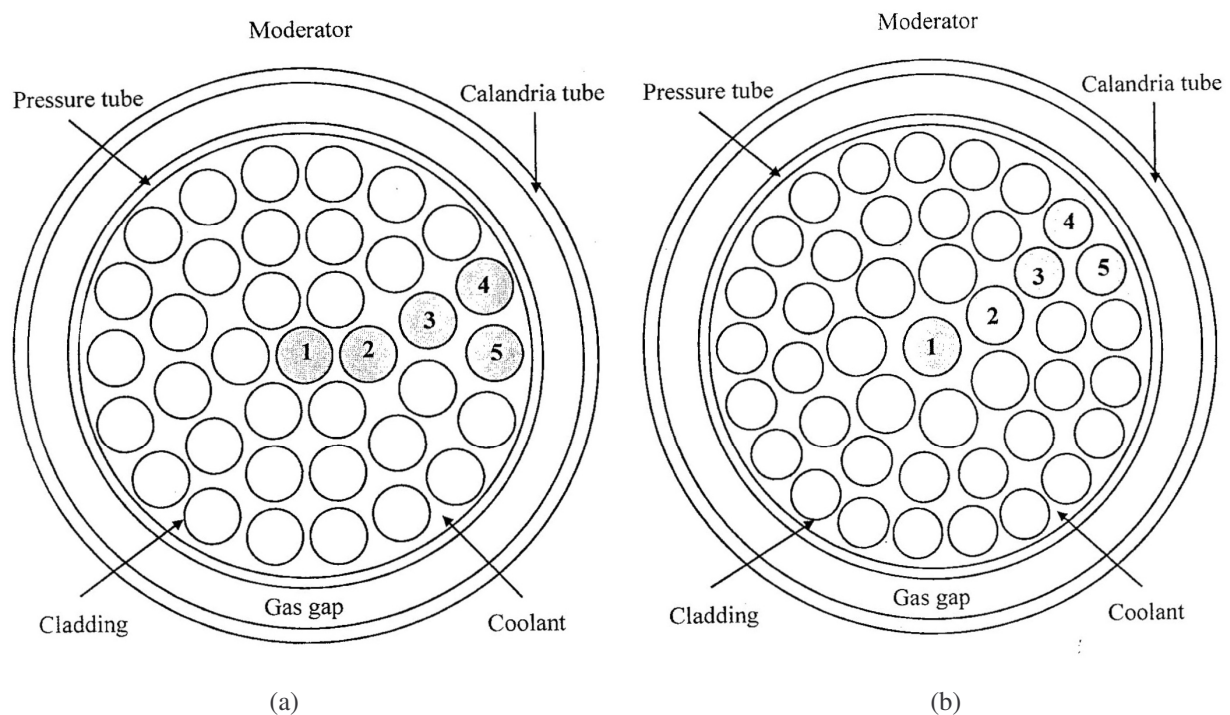


Figura 1.2 – Células combustíveis do tipo CANDU-37 (a) e CANFLEX (b).

As células canadenses CANDU-37⁴ e CANFLEX são projetos da *Atomic Energy of Canada Limited*, AECL, com 37 e 43 varetas combustíveis de UO_2 , respectivamente, em arranjos compactos no interior de tubos, concêntricos a um tubo externo e separados por uma

⁴ Maiores detalhes na seção 5.3.

região de gás, conforme ilustrado na Figura 1.2. A célula do tipo CANFLEX, em particular, possui varetas de diâmetros diferentes.

Kim e Cho [Kim e Cho, 1998] determinam pelo método de Monte Carlo fatores de Dancoff com absorção parcial (*Grey Dancoff Factors*) para calcular a criticalidade de arranjos combustíveis muito próximos. Para isso, introduzem o conceito de fator de Dancoff equivalente no cálculo da ressonância baseado no teorema da equivalência. Esse novo conceito, baseado no modelo realístico, no qual a configuração geométrica real e a seção de choque macroscópica total do combustível são considerados, produz uma probabilidade de escape ao combustível precisa e pode ser usada no cálculo da ressonância assim como o fator de Dancoff para materiais perfeitamente absorvedores, *Black Dancoff factor*.

Pelo método probabilístico, são calculados os fatores de Dancoff para cinco posições distintas de varetas, tanto para as células do tipo CANDU-37, quanto CANFLEX. Os resultados obtidos são comparados aos de Carlvik e aos produzidos pela rotina DANCOFF-MC. Após, os dados foram aplicados no cálculo da criticalidade usando o código WIMS.

Os valores obtidos para os fatores de Dancoff com absorção parcial [Kim e Cho, 1998] são satisfatórios, podendo ser utilizados em cálculos de ressonância para qualquer tipo de combustível, sem dificuldades, minimizando os erros que ocorrem quando se utiliza os fatores de Dancoff para materiais perfeitamente absorvedores.

O código WIMS possuía uma rotina responsável pelo cálculo das probabilidades de colisão em duas dimensões para células combustíveis cilíndricas. Em [Bogado, 2000], melhorias no cálculo das probabilidades são propostas, incorporando-se uma técnica de integração mais eficiente. A malha de integração, Figura 1.3, originalmente fixa, independente das regiões da célula, passa a ser construída para cada região que contém algum tipo de material, acabando com o excesso ou falta de linhas em certas regiões. As integrais, calculadas pela regra trapezoidal simples, passam a ser calculadas por regra trapezoidal estendida, para a variável angular, e por quadratura gaussiana para a variável radial.

Conseqüentemente, o problema de convergência é minimizado, já que esta depende fortemente do tipo de malha e do modelo numérico utilizado para o cálculo das integrais, além do número de linhas que atravessam a região de interesse.

Infelizmente, valores precisos para as probabilidades de escape e colisão são encontrados na literatura apenas para geometrias simples e situações idealizadas. Faz-se necessário, então, desenvolver um método independente capaz de calculá-las para casos mais gerais, a fim de comparar os métodos PIJ, o original, e PIJM, proposto por [Bogado, 2000].

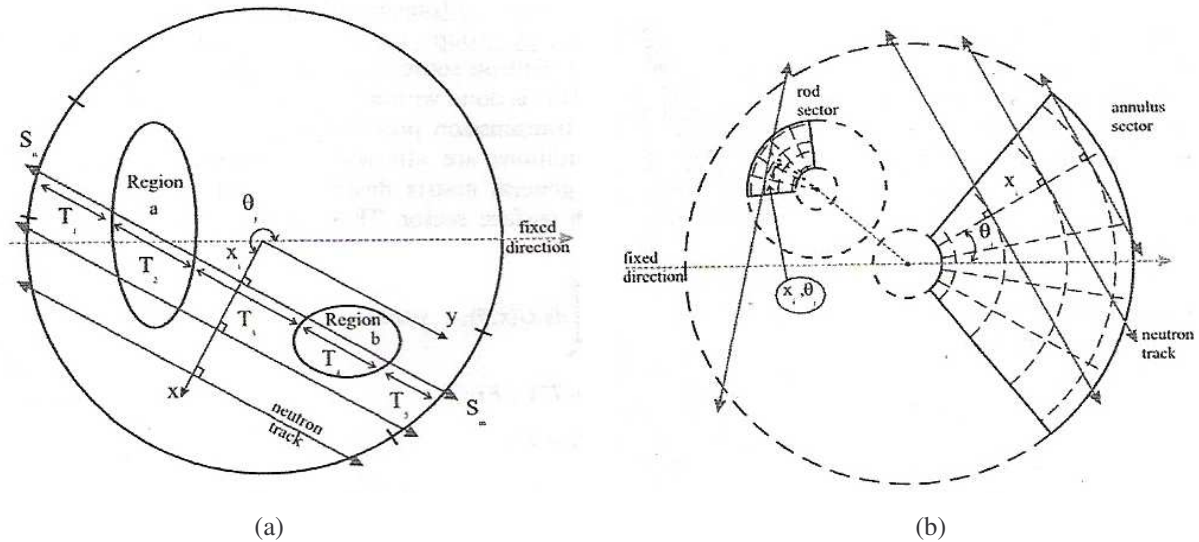


Figura 1.3 – Malhas de integração utilizadas em PIJ (a) e PIJM (b).

Em [Bogado, 2003], emprega-se o método de Monte Carlo para determinar as probabilidades de colisão para células com contornos externos quadrados e cilíndricos, com arranjos de varetas arbitrários em seu interior, como mais uma alternativa de cálculo. As probabilidades de colisão das regiões mais externas para regiões concêntricas mais internas são obtidas a partir da aplicação do teorema da reciprocidade⁵, dado por

$$\Sigma_1 V_1 P_1 = \Sigma_2 V_2 P_2, \quad (1.5)$$

que relaciona a taxa de absorção de um nêutron num volume V_1 devido a uma fonte num volume V_2 com a probabilidade de um nêutron produzido uniformemente em V_2 ser absorvido em V_1 .

Essa técnica resultou na sub-rotina PIJMC, a qual foi implementada na versão WIMS-D4 v.101 utilizada pela CNEN.

Com esse trabalho, Bogado [Bogado, 2003] mostra a dificuldade de PIJ na determinação de probabilidades de colisão e escape para células com contorno quadrado e valida a consistência de seus resultados obtidos por PIJM, em qualquer tipo de célula.

Em artigo publicado na Kerntechnik, [Bogado et al., 2004a] a sub-rotina PIJM é modificada para calcular os fatores de Dancoff para arranjos de varetas combustíveis com materiais perfeitamente absorvedores, *Black Dancoff factors*, para células cilíndricas a partir de um método determinístico. As funções de Bickley passam a ser obtidas através de uma aproximação racional de Chebyshev, a qual garante erros relativos da ordem de 10^{-23} para o intervalo $0 \leq x \leq 6$ para $Ki_3(x)$. A aproximação, combinada com a relação de recorrência, produz um método estável de se computar $Ki_3(x)$ para uma vasta gama de argumentos, conforme [Blair et al., 1978].

⁵ Maiores detalhes no Apêndice II.

O método foi validado comparando-se os dados àqueles da rotina DASQHE [Carlvik, 1967] e com os cálculos de Monte Carlo para as células CANDU-37 e CANFLEX. O aumento não significativo do tempo computacional, somado à precisão dos resultados, tornam-no mais uma opção para a determinação dos fatores de Dancoff em células combustíveis com contorno externo cilíndrico.

Em [Bogado et al., 2004b], a sub-rotina PIJMC adapta-se para calcular fatores de Dancoff para absorvedores perfeitos pelo método de Monte Carlo, nos casos mais gerais de células irregulares, com o objetivo de verificar a precisão do cálculo direto discutido brevemente acima. Por estarem disponíveis na literatura específica apenas na forma gráfica, em função dos parâmetros da célula, os valores foram testados contra aqueles obtidos por uma rotina precisa, em arranjos regulares de varetas idênticas, com excelentes resultados.

Diante disso, sugere-se, neste trabalho, que os fatores de Dancoff com absorção parcial para células cilíndricas sejam obtidos pelo método direto utilizando-se a definição alternativa, em função das probabilidades de colisão, citado em [Bogado et al., 2004b] e o cálculo implementado nas sub-rotinas existentes no código WIMS.

2 Absorção Ressonante em Sistemas Heterogêneos

2.1 Método das Probabilidades de Colisão

Seja um sistema de duas regiões contendo material absorvedor (combustível) e moderador na região F, de volume V_F , e moderador, não necessariamente o mesmo, na região M, de volume V_M , ver Figura 2.1. As seguintes considerações são feitas:

- dentro de cada região as densidades e as composições são uniformes;
- as seções de choque de espalhamento do moderador da região F, Σ_{mF} , e do moderador da região M, Σ_{mM} , são constantes ou variam lentamente com a energia;
- as seções de choque de absorção, $\Sigma_{aF}(E)$, e de espalhamento, $\Sigma_{sF}(E)$, do absorvedor têm ressonâncias;
- o fluxo de nêutrons, oriundo da moderação dos nêutrons da fonte a altas energias, é independente do tempo nas duas regiões;
- $P_i(E)$ é a probabilidade de um nêutron originado na região i com energia E fazer sua próxima colisão em outra região;
- $\varphi_F(E)$ e $\varphi_M(E)$ são os fluxos médios no volume nas regiões F e M, respectivamente;
- as regiões F e M devem ser convexas;
- a energia fracional mínima de um nêutron, resultado da conservação de energia e de *momentum*, após espalhamento elástico, é

$$\alpha \equiv \left[\frac{(A-1)}{(A+1)} \right]^2, \quad (2.1)$$

onde A é o número de massa do núcleo envolvido na colisão.

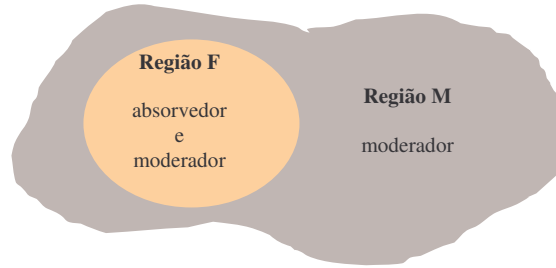


Figura 2.1 – Esquema com as regiões F e M.

A seção de choque macroscópica total da região F é dada por

$$\Sigma_{tF} = \Sigma_{aF} + \Sigma_{sF} + \Sigma_{mF}, \quad (2.2)$$

conseqüentemente, a taxa de colisão total será

$$TC_F = V_F \Sigma_{tF}(E) \varphi_F(E). \quad (2.3)$$

Após sofrer uma colisão na região M, alguns nêutrons, com energia E, chegam à região F onde terão sua próxima colisão. A taxa de colisão na região F, devido aos nêutrons vindos da região M, será

$$TC_{FM} = P_M(E) V_M \int_E^{E/\alpha_{mM}} \frac{\Sigma_{mM} \varphi_M(E')}{(1 - \alpha_{mM}) E'} dE', \quad (2.4)$$

onde o produto da integral pelo volume é a taxa na qual os nêutrons alcançam a energia E na região M.

Analogamente, a taxa de colisão na região F devido a nêutrons, que chegam à energia E após sofrer colisão na região F, que terão sua próxima colisão nesta mesma região, é dada por

$$TC_{FF} = [1 - P_F(E)] V_F \left\{ \int_E^{E/\alpha_{mF}} \frac{\Sigma_{mF} \varphi_F(E')}{(1 - \alpha_{mF}) E'} dE' + \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF} \varphi_F(E')}{(1 - \alpha_a) E'} dE' \right\}, \quad (2.5)$$

onde a primeira integral representa o espalhamento pelo moderador misturado ao absorvedor, e a segunda representa o espalhamento pelo absorvedor.

Assim, a taxa de colisão total, TC_F , deverá ser igual à soma das duas outras taxas, TC_{FM} e TC_{FF} , isto é,

$$V_F \Sigma_{tF} \varphi_F = [1 - P_F] V_F \left\{ \int_E^{E/\alpha_{mF}} \frac{\Sigma_{mF} \varphi_F}{(1 - \alpha_{mF}) E'} dE' + \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF} \varphi_F}{(1 - \alpha_a) E'} dE' \right\} + P_M V_M \int_E^{E/\alpha_{mM}} \frac{\Sigma_{mM} \varphi_M}{(1 - \alpha_{mM}) E'} dE'. \quad (2.6)$$

Essa é a equação de balanço fundamental para computar a absorção por ressonância em sistemas heterogêneos. Embora sendo uma equação exata, na maioria dos sistemas heterogêneos, a distribuição dos nêutrons é independente da posição em cada região, pelo menos para aqueles

com energias distantes dos picos de ressonância. Justifica-se, então, a introdução de um postulado, já que o modelo requer que os nêutrons sejam distribuídos uniformemente no espaço.

2.1.1 Postulado da fonte planar

Nesta aproximação, $P_F(E)$ e $P_M(E)$ são obtidas para fontes de nêutrons espacialmente constantes nas regiões F e M. Como o próprio nome diz, assume-se que o sistema possui uma fonte planar ou um fluxo sem “*perturbações*”. Cada colisão removerá um nêutron da energia E devido a uma absorção ou a um espalhamento.

2.1.2 Relação geral de reciprocidade

A taxa de absorção de um nêutron em V_F devido a uma fonte em V_M é também a probabilidade de um nêutron produzido uniformemente em V_M ser absorvido em V_F ,

$$\Sigma_{mM} V_M P_M = \Sigma_{tF} V_F P_F. \quad (2.7)$$

Conforme mencionado acima, não há restrições quanto à geometria das regiões, desde que as mesmas sejam convexas. É razoável supor a validade desse postulado para o caso de um reator em funcionamento estacionário.

A partir da Equação (2.7) isola-se a probabilidade P_M e substitui-se na Equação (2.6), visando a deixá-la apenas em função de P_F . Conseqüentemente,

$$\begin{aligned} \Sigma_{tF} \varphi_F = [1 - P_F] \left\{ \int_E^{E/\alpha_{mF}} \frac{\Sigma_{mF} \varphi_F}{(1 - \alpha_{mF}) E'} dE' + \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF} \varphi_F}{(1 - \alpha_a) E'} dE' \right\} \\ + \Sigma_{tF} P_F \int_E^{E/\alpha_{mM}} \frac{\varphi_M}{(1 - \alpha_{mM}) E'} dE'. \end{aligned} \quad (2.8)$$

2.1.3 Aproximação NR

Ambas as integrais do moderador na Equação (2.8), a primeira e a terceira, serão dominadas por contribuições que estão longe o suficiente do pico de ressonância dependente do material e da energia do combustível em questão, de maneira que o fluxo não é significativamente perturbado por ela. Portanto, utiliza-se a aproximação NR, ou seja, negligencia-se o efeito da ressonância no fluxo das integrais. Sendo $(1 - \alpha_m)$ muito maior que $(1 - \alpha_a)$, pois o absorvedor é muito mais “pesado” (α_a é próximo de um, e α_m é próximo de zero), a aproximação NR é apropriada para o moderador.

Se os picos de ressonância estão bem separados, é razoável assumir que outras ressonâncias não afetarão muito as integrais. Então, utiliza-se a chamada aproximação “recuperação de fluxo”, do inglês *Narrow Resonance (NR)*, que faz o fluxo assumir um valor assintótico entre as ressonâncias.

Tem-se que,

$$\int_E^{E/\alpha_{mF}} \frac{\Sigma_{mF} \varphi_F}{(1 - \alpha_{mF}) E'} dE' = \Sigma_{mF} \frac{1}{E} \quad (2.9)$$

e

$$\int_E^{E/\alpha_{mM}} \frac{\varphi_M}{(1 - \alpha_{mM}) E'} dE' = \frac{1}{E}. \quad (2.10)$$

Conseqüentemente,

$$\Sigma_{tF} \varphi_F = (1 - P_F) \int_E^{E/\alpha_a} \frac{\Sigma_{sF} \varphi_F}{(1 - \alpha_a) E'} dE' + \frac{1}{E} [\Sigma_{mF} + P_F (\Sigma_{sF} + \Sigma_{aF})]. \quad (2.11)$$

Para o caso de uma única vareta imersa num meio moderador infinito, P_F é equivalente à probabilidade de escape do combustível. Porém, se a região do combustível é mais complicada, como, por exemplo, uma rede de varetas, a probabilidade de escape P_F deve ser modificada por uma correção,

$$P_F = P_0 (1 - C), \quad (2.12)$$

onde P_0 é a probabilidade de escape da vareta isolada e C é o fator de Dancoff detalhado no próximo capítulo.

3 O Fator de Dancoff

No contexto em que é apresentada a Equação (2.12), a correção $(1 - C)$ é a probabilidade de um nêutron, emergindo da superfície de uma vareta de combustível, entrar em outra vareta absorvedora sem qualquer colisão no moderador. No entanto, quando Dancoff e Ginsberg, em 1944, introduziram essa correção pela primeira vez, o fizeram da seguinte maneira: se o combustível em questão se trata de uma vareta imersa num arranjo de varetas, então alguns dos nêutrons que a alcançariam deixam de fazê-lo, porque alcançam as varetas adjacentes antes. Esse efeito, às vezes chamado de sombreamento, foi levado em conta diminuindo-se a superfície da vareta combustível, isto é,

$$S_{eff} = (1 - C)S, \quad (3.1)$$

onde S é a superfície real, S_{eff} é a superfície efetiva e C é a correção proposta por Dancoff.

Para materiais perfeitamente absorvedores, pode ser mostrado que a correção da Equação (3.1) trata-se da mesma, presente na Equação (2.12), para expressar a probabilidade P_F em função da probabilidade de escape P_0 . [Carlvik, 1967]

Alternativamente, considerando-se as correntes de nêutrons que entram pelas superfícies das varetas, essa correção pode ser entendida como a redução relativa na corrente de nêutrons, I , que incide na vareta, em relação à corrente, I_0 , que o faria se a vareta estivesse isolada num meio moderador infinito,

$$C = 1 - \frac{I}{I_0}. \quad (3.2)$$

3.1 Black Dancoff factors – materiais perfeitamente absorvedores

Para um corpo negro imerso num meio homogêneo infinito com densidade de fonte constante, o fator de Dancoff mede o quanto a corrente de nêutrons que entra através da superfície do corpo é reduzida pelo sombreamento dos corpos negros da vizinhança. Uma expressão para esse fator é obtida quando eliminamos a coordenada axial e definimos a probabilidade que nêutrons, oriundos de uma fonte planar e isotrópica, irão percorrer uma espessura óptica, τ , no plano perpendicular ao axial, sem colisões, Figura 3.1.

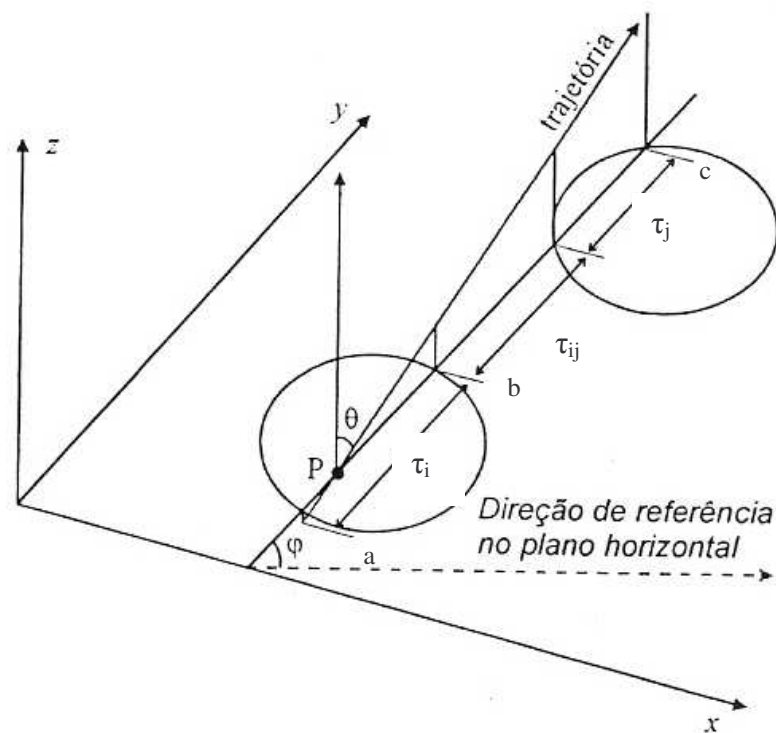


Figura 3.1 – Esquema simplificado mostrando a projeção da trajetória do nêutron no plano xy e dois corpos negros, i e j .

$$P(\tau) = \frac{1}{2} \int_0^{\pi} (\text{sen } \theta) \exp\left(-\frac{\tau}{\text{sen } \theta}\right) d\theta = Ki_2(\tau) \quad (3.3)$$

A Equação (3.3), também conhecida como a função de Bickley de ordem dois, expressa a probabilidade de nêutrons, oriundos de uma fonte linear, percorrerem uma espessura óptica, τ , em um elemento angular azimutal, $d\phi$, sem colidirem. Onde, em (3.3), a espessura óptica é o produto da seção de choque macroscópica total, da região em questão, pela distância geométrica, r , percorrida pelo nêutron, e pelo seno do ângulo que a trajetória faz com o eixo axial,

$$\tau = \Sigma r(\text{sen } \theta). \quad (3.4),$$

e $Ki_2(\tau)$, é a função de Bickley de ordem dois.

Sejam, então, dois corpos negros i e j imersos em um meio homogêneo infinito com densidade de fonte constante, ver Figura 3.1. A corrente de nêutrons I que entra pela superfície de i , a partir de um elemento de volume da , é proporcional à probabilidade que nêutrons irão mover-se ao longo de uma linha na direção y , de $y = 0$ a $y = c$, até a superfície de i sem colidir.

Então,

$$I \propto \frac{1}{c} \left\{ \int_0^a Ki_2[\Sigma(a-y) + \tau_j + \tau_{ij}] dy + \int_a^b Ki_2[\Sigma_j(b-y) + \tau_{ij}] dy + \int_b^c Ki_2[\Sigma(c-y)] dy \right\}, \quad (3.5)$$

sendo Σ a seção de choque macroscópica total da região entre os dois corpos, e Σ_i e Σ_j , as seções de choque macroscópicas totais dos corpos i e j , respectivamente. Por se tratarem de corpos negros, tanto i quanto j , os termos τ_j , na primeira integral, e Σ_j , na segunda integral, tendem a infinito, zerando o integrando dos dois primeiros termos da equação acima, de acordo com as Equações (3.3) e (3.4), de maneira que

$$I \propto \frac{1}{c} \int_b^c Ki_2[\Sigma(c-y)] dy. \quad (3.6)$$

Caso o corpo j não existisse, a corrente acima seria proporcional a

$$I_0 \propto \frac{1}{c} \int_0^c Ki_2[\Sigma(c-y)] dy. \quad (3.7)$$

Definindo a grandeza adimensional $w = \Sigma(c-y)$, então,

$$dy = -\frac{dw}{\Sigma}, \quad (3.8)$$

substituem-se as varáveis nas Equações (3.6) e (3.7), e conseqüentemente alteram-se os limites de integração, chegando a

$$\begin{aligned} I &\propto -\frac{1}{\Sigma c} \int_{\tau_{ij}}^0 Ki_2(w) dw \\ &\propto \frac{1}{\Sigma c} [Ki_3(0) - Ki_3(\tau_{ij})] \\ &\propto \frac{1}{\Sigma c} \left[\frac{\pi}{4} - Ki_3(\tau_{ij}) \right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

e

$$I_0 \propto -\frac{1}{\Sigma c} \int_{\Sigma c}^0 Ki_2(w) dw$$

$$\propto \frac{1}{\Sigma c} [Ki_3(0) - Ki_3(\Sigma c)] \quad (3.10a)$$

$$\propto \frac{1}{\Sigma c} \frac{\pi}{4} \quad (3.10b),$$

onde o segundo termo da subtração da Equação (3.10a) tende a zero à medida que o valor de c aumenta, Ki_3 são funções de Bickley de ordem três dadas por

$$Ki_3(\tau) = \int_0^{\pi/2} (\text{sen}\theta)^2 \exp\left(-\frac{\tau}{\text{sen}\theta}\right) d\theta, \quad (3.11)$$

sendo que

$$Ki_3(0) = \frac{\pi}{4}.$$

As correntes totais entrando em i são obtidas a partir da razão entre produto das Equações (3.9) e (3.10b) pelo elemento de volume $c(x, \alpha) dx d\alpha$ integrando-se sobre x e α , e o

produto de $\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} c dx$, ou seja,

$$I \propto \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{p(\alpha)} \left[\frac{\pi}{4} - Ki_3(\tau_{ij}) \right] dx d\alpha}{\Sigma \int_0^{2\pi} \int_0^{p(\alpha)} c dx d\alpha} \quad (3.12)$$

e

$$I_0 \propto \frac{\frac{\pi}{4} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} dx}{\Sigma \int_0^{2\pi} \int_0^{p(\alpha)} c dx d\alpha}. \quad (3.13)$$

De acordo com a definição do fator de Dancoff dada pela Equação (3.2), e atentando para o fato que

$$\int_0^{2\pi} d\alpha dx = 2S_i \quad (3.14)$$

onde S_i é a superfície de i por unidade de comprimento, então,

$$C = 1 - \frac{I}{I_0} = 1 - \frac{\int_0^{2\pi} \int_0^{p(\alpha)} \left[\frac{\pi}{4} - Ki_3(\tau_{ij}) \right] dx d\alpha}{\frac{\pi}{4} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} dx}$$

$$= \frac{2}{\pi S_i} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} Ki_3(\tau_{ij}) dx. \quad (3.15)$$

Para o caso de uma vareta combustível com contorno externo cilíndrico, a equação (3.15) pode ser escrita como

$$C = 1 - \frac{I}{I_0} = \frac{1}{\pi^2 r} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_{-r}^r Ki_3[\tau(\alpha, x)] dx, \quad (3.16)$$

onde r é o raio da vareta, τ é a espessura óptica entre as varetas, caracterizada pela distância mínima da projeção da trajetória do nêutron em relação ao centro da célula (x) e pelo ângulo que este faz com o eixo de referência (α), e Ki_3 são funções de Bickley de ordem três. Todos os cálculos determinísticos para o fator de Dancoff para elementos de combustível cilíndricos usam uma integração analítica sobre o ângulo entre a direção de vôo e o eixo z , resultando numa função de Bickley de ordem três. [Fehér et al., 1994]

3.2 Grey Dancoff factors – materiais parcialmente absorvedores

Quando o material da vareta combustível é parcialmente absorvedor, pode-se assumir que sua seção de choque macroscópica total é menor que a seção de choque macroscópica total do material moderador. Conforme visto anteriormente, para o caso de uma única vareta i , imersa num meio moderador infinito, a corrente de nêutrons que chega a essa vareta é I_0 . Superpõe-se, então, a este sistema um arranjo de varetas, também contendo material parcialmente absorvedor. Agora, a corrente que chega à mesma vareta, devido às demais varetas do meio, é I .

Atentando para o fato mencionado acima, relativo às seções de choque envolvidas, percebe-se que a inserção desse arranjo de varetas modifica a seção de choque do entorno à vareta em questão, diminuindo a seção de choque macroscópica total desse meio. Conseqüentemente, a corrente I que chegará a essa vareta será maior que aquela que o faria se a vareta estivesse isolada, I_0 . Assim, tem-se que

$$\frac{I}{I_0} > 1, \quad (3.17)$$

e, conseqüentemente, da Equação (3.2) obtêm-se $C < 0$.

Sendo C , o fator de Dancoff, definido neste trabalho como uma probabilidade, seu valor deve pertencer ao intervalo $0 \leq C \leq 1$, de maneira que valores negativos atribuídos a esse fator estão desprovidos de significado físico. Portanto, para sistemas com absorção parcial, a interpretação original não mais se aplica devendo-se utilizar a definição apropriada em termos de probabilidades de escape e colisão.

Para arranjos infinitos de varetas idênticas, [Nordheim, 1962] derivou a seguinte relação:

$$P_F = P_0 \frac{1-C}{1-C(1-\Sigma_{TF}\bar{r}P_0)}, \quad (3.18)$$

onde Σ_{TF} é a seção de choque macroscópica total do combustível e \bar{r} é o comprimento médio da corda na região combustível, isto é,

$$\bar{r} = \frac{4V}{A_s} \quad (3.19)$$

onde V é o volume e A_s é a área, ambos da região combustível.

Para arranjos finitos de varetas semitransparentes, expressões semelhantes para os fatores de Dancoff foram deduzidas em termos do número de varetas e da área superficial das varetas no cluster [Kim e Cho, 1999].

A partir da Equação (2.12), temos que o fator de Dancoff, C , pode ser escrito como

$$C = 1 - \frac{P_F}{P_0} = \frac{P_0 - P_F}{P_0}, \quad (3.20)$$

lembrando que P_F é a probabilidade de um nêutron, originário do combustível, ter sua próxima colisão no moderador e P_0 , por sua vez, é a probabilidade de escape do combustível em questão.

4 O Código WIMS e a sub-rotina PIJM

O código WIMS, o qual se baseia na equação de transporte de Boltzmann, fundamental na descrição de processos difusivos, é um dos mais empregados na atualidade por tratar tanto barras combustíveis quanto porções mais extensas do núcleo do reator. Composto por diversos módulos, ou sub-rotinas, responsáveis pela determinação de fatores específicos, descreve o fluxo de nêutrons em reatores nucleares.

A sub-rotina PIJM, originalmente chamada de PIJ, pertencente ao código foi desenvolvida para calcular probabilidades de colisão em multigrupos de energia para geometrias bidimensionais complicadas, contemplando atualmente sistemas com contornos externos cilíndricos e quadrados, ilustrados na Figura 4.1 (a) e (b), respectivamente. Embora essa última configuração represente melhor uma situação real⁶, no presente trabalho, centra-se a atenção à primeira configuração, ficando a segunda como sugestão a ser tratada *a posteriori*.

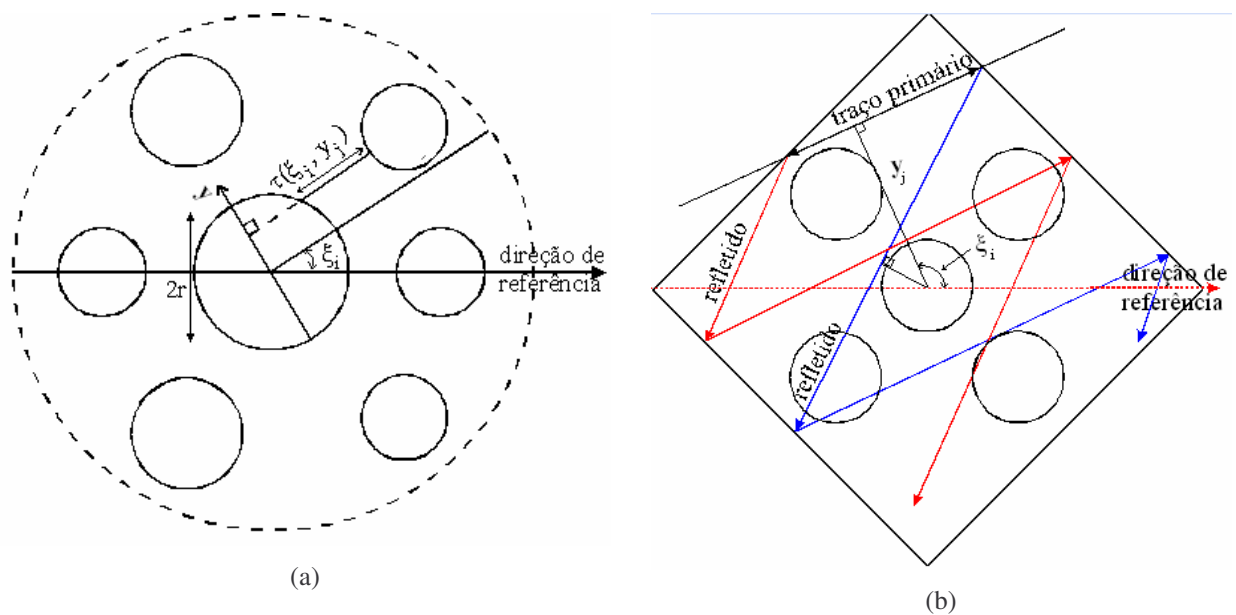


Figura 4.1 – Célula cilíndrica (a) e célula quadrada (b).

⁶ Para maiores detalhes consultar Apêndice IV.

4.1 A Sub-rotina PIJM

A primeira versão dessa sub-rotina chamava-se PIJ, cuja finalidade foi sucintamente descrita acima. A suposição básica feita era que cada região, em um determinado grupo de energia, tem uma densidade de emissão planar (*flat*) constante e que os nêutrons são emitidos ou espalhados isotropicamente e uniformemente. Nessa sub-rotina as matrizes $P(i,j)$ são calculadas para todo i, j , com $P(i,j)$ a probabilidade de um nêutron, originado isotropicamente na região i com energia E ter sua próxima colisão na região j (probabilidade de transmissão de i para j).

A malha de integração original era composta por conjuntos de linhas paralelas, espaçadas igualmente na direção radial, traçadas para cada um dos ângulos azimutais, igualmente incrementados, em relação a uma direção de referência cobrindo toda a célula, conforme ilustra a Figura 4.2. Sobre essa malha, as integrações duplas das funções de Bickley eram calculadas por regra trapezoidal simples.

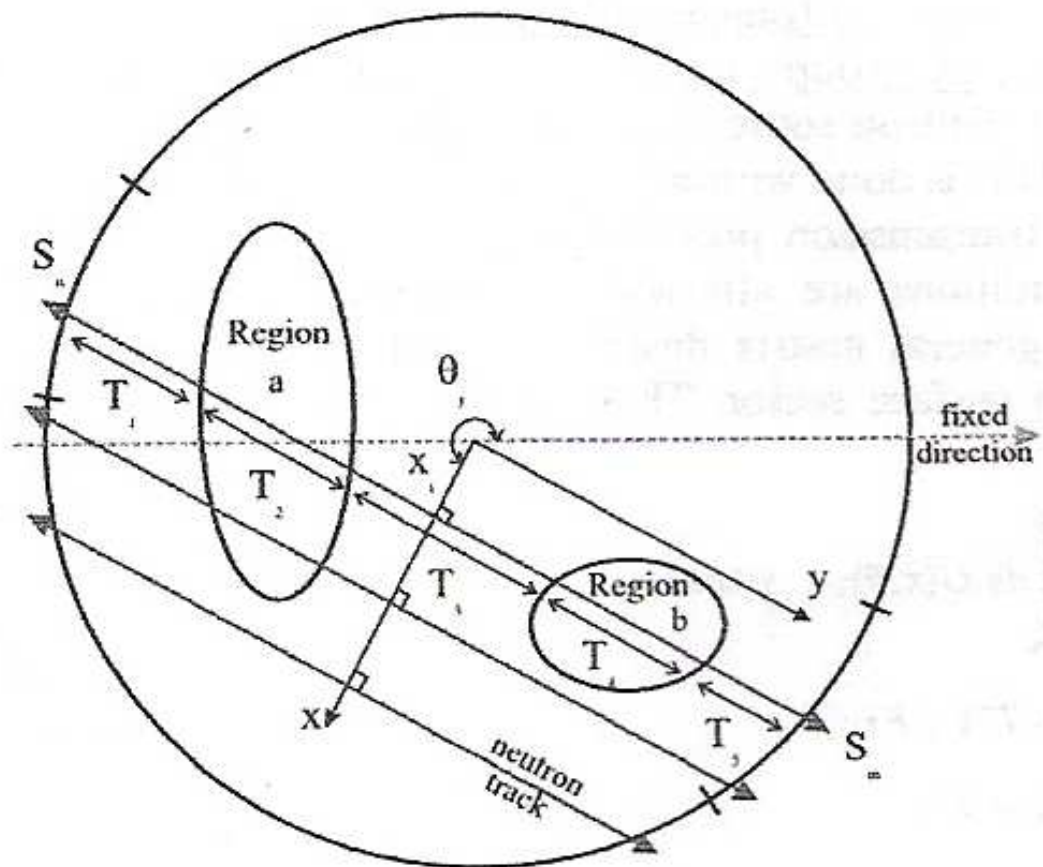


Figura 4.2 – Malha de integração utilizada em PIJ [Bogado, 2000].

A malha era independente do tamanho das regiões que compunham a célula, de maneira que regiões pequenas eram atravessadas por um número relativamente menor de linhas, acarretando em desvios consideráveis nas probabilidades de colisão das mesmas. Embora rápido, o esquema de cálculo mostrava-se ineficiente, já que o esquema de integração e o tipo de malha influenciam diretamente a convergência das probabilidades calculadas.

Para contornar esse problema, introduzem-se modificações na malha e no esquema de integração, e a sub-rotina passa a chamar-se PIJM. Ela mantém o esquema “*tracking*” da PIJ, baseado no cálculo das distâncias percorridas pelo traço do nêutron através da célula, contudo melhora o esquema de integração e constrói malhas próprias para cada região que contém material, Figura 4.3, evitando, assim, o excesso de linhas em algumas regiões e a falta de linhas em outras [Bogado, 2000].

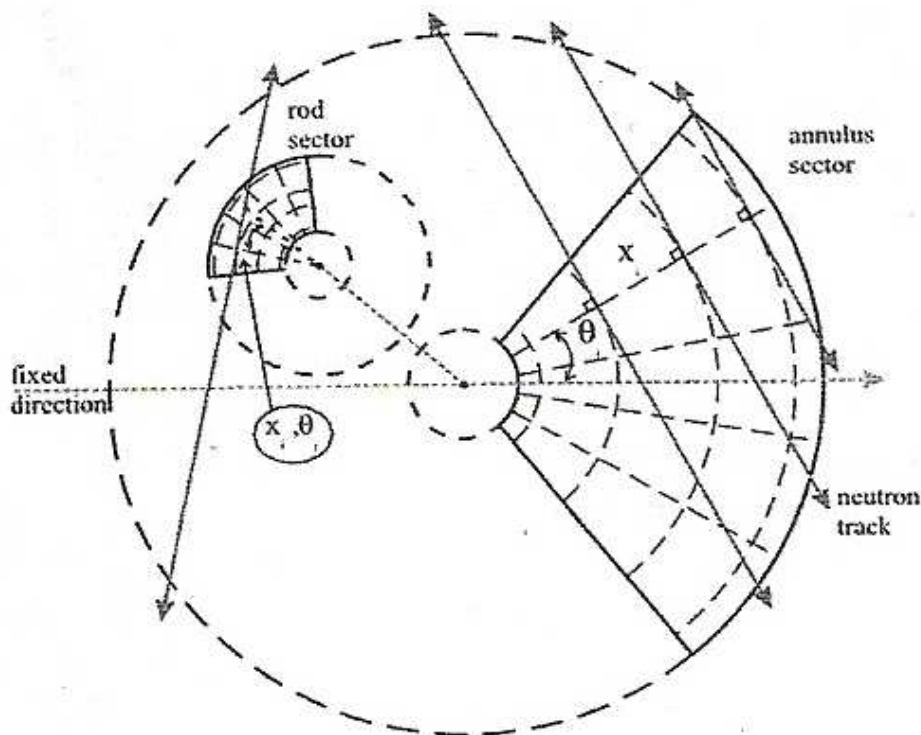


Figura 4.3 – Para cada direção radial definida por θ_j , um conjunto de linhas paralelas é desenhado perpendicularmente a essa distando x_i do centro da célula ou do anel, com x_i as quadraturas da integração radial [Bogado, 2000].

As integrais duplas das funções de Bickley passam a ser calculadas utilizando-se quadratura de Gauss, para a integração radial, e regra trapezoidal estendida, para a integração angular, em cada região, mantendo-se aproximadamente o mesmo número de pontos de quadratura e de incremento angular. Essas modificações resultam em melhorias significativas nos fatores de Dancoff, comprovadas por comparações com resultados precisos existentes na literatura em situações simples [Carlvik, 1967; Bogado et al., 2004a]. Os fatores assim

calculados, entretanto, consideravam as regiões combustíveis formadas por materiais perfeitamente absorvedores (*Black Dancoff factors*), uma representação simplificada da realidade encontrada no núcleo de um reator.

Todas as probabilidades são calculadas a partir da integração das funções de Bickley, salvo aquelas entre regiões de grande volume e regiões de pequeno volume, as quais são obtidas através de relações de reciprocidade, já mencionadas na Seção 2.1.2, garantindo assim melhor convergência que o cálculo direto dessas probabilidades. [Bogado, 2000]

As opções de simetria disponíveis em PIJ, e também em PIJM, indicam apenas que certas trajetórias de nêutrons são repetidas em posições simétricas e, conseqüentemente, contribuições para o cálculo das probabilidades são efetuadas uma única vez, reduzindo o número de regiões envolvidas nas matrizes e o número de ângulos requeridos na integração numérica.

4.2 As matrizes de probabilidade calculadas por PIJM

Para cada grupo de energia, a sub-rotina calcula as probabilidades de transmissão entre regiões ($P_{i \rightarrow j}$), região e superfície ($RS_{i \rightarrow m}$), superfície e região ($SR_{m \rightarrow i}$) e superfícies ($SS_{m \rightarrow n}$), considerando-se que as fontes de nêutron, dentro de cada região, estão distribuídas uniformemente e que a emissão é isotrópica. O ambiente do sistema não é levado em conta, sendo as condições de contorno incorporadas após os cálculos a partir de uma matriz geral [Anderson, 1973].

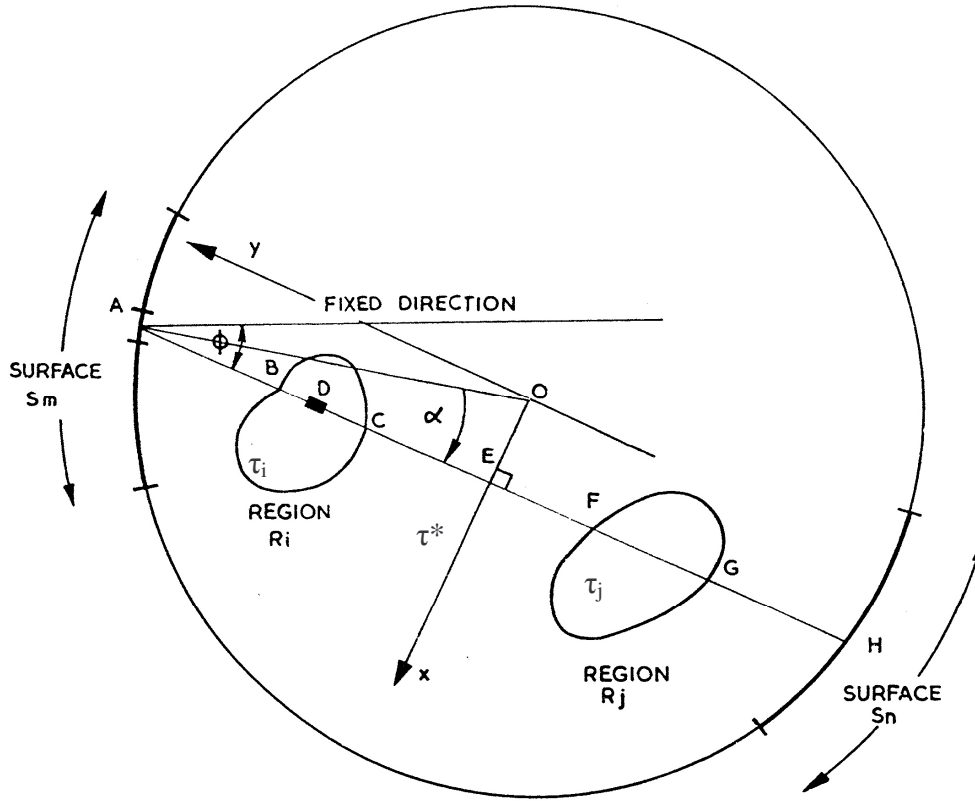


Figura 4.4 – Seção transversal de uma célula mostrando as regiões i e j e as superfícies m e n [Anderson, 1973].

A probabilidade de um nêutron emitido uniforme e isotropicamente na região R_i colidir em R_j , de acordo com a Figura 4.4, é dada por:

$$P_{i \rightarrow j} = \frac{1}{2\pi \Sigma_i V_i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} [Ki_3(\tau_i + \tau_j + \tau^*) + Ki_3(\tau^*) - Ki_3(\tau_i + \tau^*) - Ki_3(\tau_j + \tau^*)] dx. \quad (4.1)$$

Conseqüentemente, a probabilidade de um nêutron emitido uniforme e isotropicamente na região R_i colidir na mesma região R_i , é dada por:

$$P_{i \rightarrow i} = 1 - \frac{1}{2\pi \Sigma_i V_i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{\infty} [Ki_3(0) - Ki_3(\tau_i)] dx, \quad (4.2)$$

onde K_{i3} é a função de Bickley de ordem três, T_i é a espessura óptica através da região R_i , T^* é a espessura óptica entre as duas regiões consideradas, Σ_i é a seção de choque total média para um determinado grupo de energia e V_i é o volume por unidade de altura, ambos da região R_i . Trocando-se o sub-índice i por j tem-se as mesmas grandezas relativas à região j .

A probabilidade de um nêutron emitido uniforme e isotropicamente na região R_i escapar pela superfície S_m sem colidir na célula ($RS_{i \rightarrow m}$) é dada por

$$RS_{i \rightarrow m} = \frac{1}{2\pi \Sigma_i V_i} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} [Ki_3(T^*) - Ki_3(T_i + T^*)] dx. \quad (4.3)$$

Para estimar o valor da probabilidade de transmissão entre superfícies fazem-se necessárias algumas suposições a respeito da maneira pela qual os nêutrons entram na célula. Esta distribuição é, em geral, desconhecida, dependendo fortemente das propriedades nucleares próximas à borda da célula. Assim, supõe-se que a distribuição de nêutrons que retornam sobre um setor da superfície é constante, o que é consistente com a hipótese de emissão uniforme e isotrópica de nêutrons a partir das regiões. Desprezando-se as demonstrações dos cálculos intermediários utilizados se chega as seguintes relações: a probabilidade de um nêutron incidindo uniforme e isotropicamente na superfície S_m para dentro da célula ter sua primeira colisão em R_i . ($S_{m \rightarrow i}$) é dada por

$$SR_{m \rightarrow i} = \frac{2}{\pi S_m} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} [Ki_3(\tau^*) - Ki_3(\tau^* + \tau_i)] dx; \quad (4.4)$$

e a probabilidade de um nêutron incidindo uniforme e isotropicamente em S_m para dentro da célula escapar por S_n sem colidir na célula ($SS_{m \rightarrow n}$) é dada por

$$SS_{m \rightarrow n} = \frac{2}{\pi S_m} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} Ki_3(\tau^*) dx, \quad (4.5)$$

onde S_m é a área por unidade de altura da superfície m . Lembrando que todas as equações apresentadas nessa seção referem-se à Figura 4.4.

5 O Método Utilizado

Nesta seção, são apresentadas as características das células combustíveis, caracterizando-se o problema e o método de cálculo utilizado, entre outros fatores.

5.1 Definição do problema

O sistema em questão consiste de uma célula com borda externa cilíndrica infinitamente longa na direção axial dividida em anéis concêntricos a partir do centro, cada um subdividido em um número arbitrário de setores radiais caracterizados por seus ângulos diretores com relação a um eixo fixo de referência. As regiões formadas são numeradas a partir do centro da célula em sentido anti-horário, começando pelo setor de menor ângulo diretor (θ), Figura 5.1. Sendo que se um setor tem seu ângulo diretor igual a 0, na mesma linha do eixo de referência, ele receberá a primeira numeração. Esse é o caso da região 1, na Figura 5.1, que possui ângulo diretor igual a 0, sendo numerado antes da região 2 cujo ângulo diretor é igual a π .

Um conjunto de varetas, de diâmetros não necessariamente iguais, é superposto a essa configuração sendo também dividido radial e azimutalmente em relação aos seus centros. As divisões azimutais, que podem ser diferentes para cada anel da vareta, são numeradas de maneira similar em sentido anti-horário, iniciando pelo setor de menor ângulo diretor (γ) em relação ao eixo que une os centros da vareta e da célula. Varetas pertencentes a uma região anular qualquer são numeradas após a numeração de todos os setores da região anular que as contém e imediatamente antes de se passar à região anular seguinte. Regiões equivalentes de varetas idênticas recebem a mesma numeração.

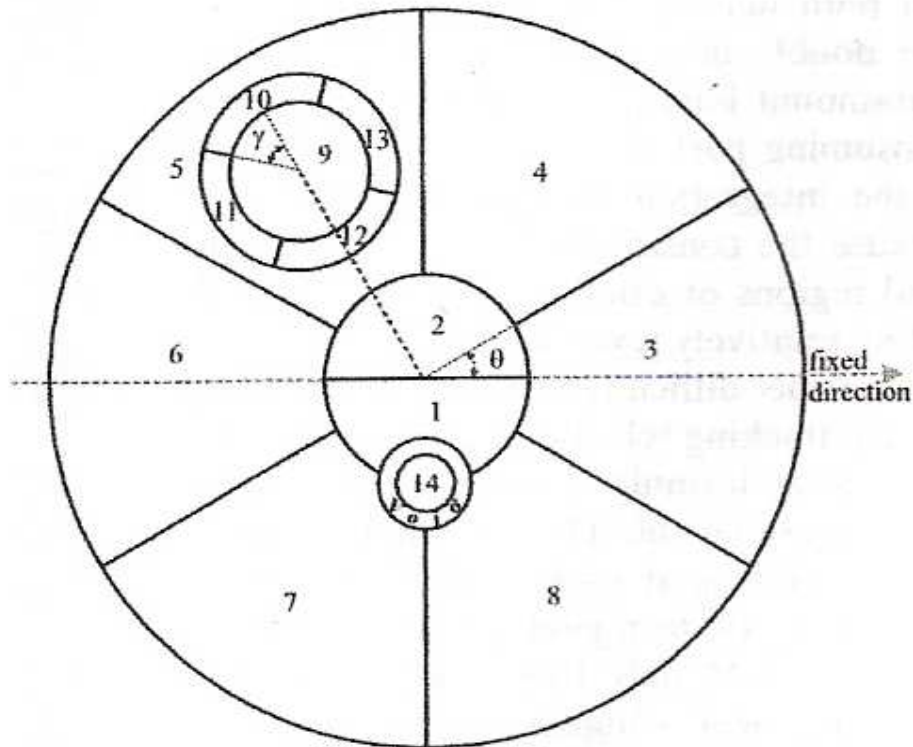


Figura 5.1 – Exemplo de uma célula cilíndrica contendo duas varetas e quatorze regiões [Bogado, 2000].

Varetas podem se sobrepor aos anéis da célula, porém não devem se sobrepor às linhas que dividem a célula em setores, a menos que sejam divididas ao meio por essas, o que é o caso da vareta pequena, região 14, na Figura 5.1. Ainda observando essa parte da figura, percebemos que as regiões de vazio não são numeradas.

Assumimos que cada região definida é composta por uma mistura homogênea de materiais, podendo existir regiões diferentes contendo a mesma mistura. Maiores detalhes sobre a geometria da célula, suas condições de contorno e outros dados de entrada necessários para PIJ podem ser encontrados em [Anderson, 1973].

5.2 Determinando os fatores de Dancoff com absorção parcial do combustível

Numa célula contendo várias varetas combustíveis, a probabilidade de um nêutron, escapando isotropicamente do combustível i ter sua próxima colisão num combustível j , P_{ij} , é dada pelo somatório sobre todos os combustíveis da célula, inclusive para $j = i$. Portanto, a probabilidade P_F , de colisão no moderador, da Equação (2.12) pode ser escrita como

$$P_F = 1 - \sum_j P_{ij}. \quad (5.1)$$

Sendo o combustível em questão do tipo i , e definindo P_{ii}' como sendo a probabilidade de autocolisão do nêutron na vareta i em questão, então podemos escrever a probabilidade P_0 , de escape do combustível, como

$$P_0 = 1 - P_{ii}'. \quad (5.2)$$

A probabilidade de autocolisão, P_{ii}' , não é necessariamente igual à probabilidade de colisão numa outra vareta do tipo i , P_{ii} .

Substituindo as relações acima na Equação (3.20), temos que o fator de Dancoff, C_i , para uma vareta do tipo i é dado por

$$C_i = \frac{(\sum_j P_{ij} - P_{ii}')}{1 - P_{ii}'}, \quad (5.3)$$

sendo este o cálculo inserido na sub-rotina PIJM para a determinação os fatores de Dancoff para materiais parcialmente absorvedores.

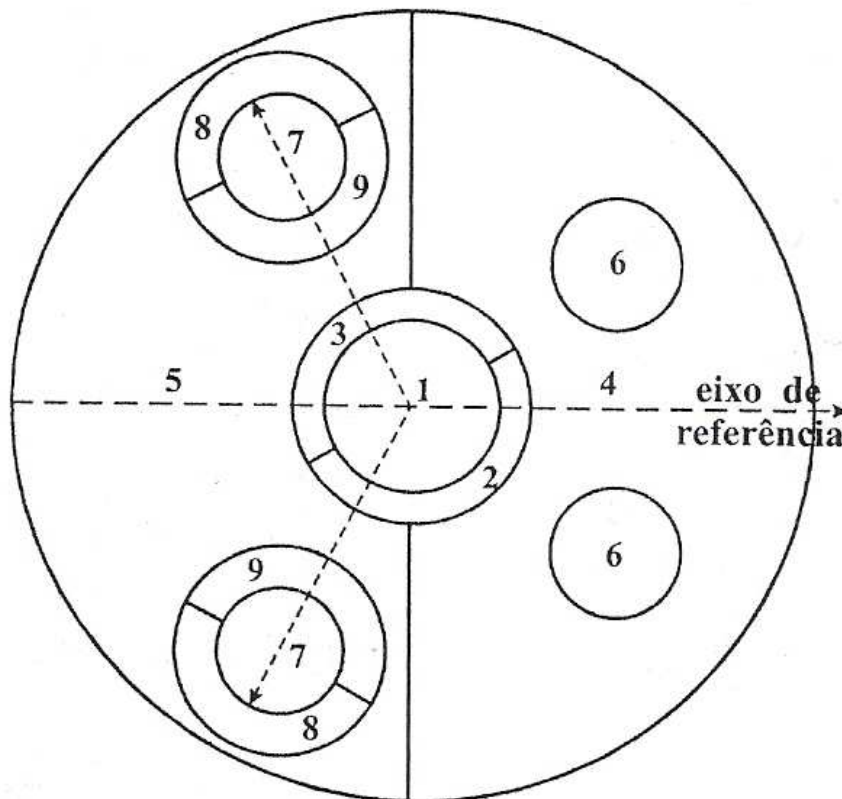


Figura 5.2 – Célula cilíndrica em geometria cluster [Bogado et al., 2004b].

No exemplo hipotético, representado na Figura 5.2, temos uma célula cilíndrica composta por 9 regiões, sendo as de número 2, 3, 8 e 9 de revestimento, as de número 4 e 5 de

moderador, e as de número 1, 6 e 7 de combustível. Nesse caso, o fator de Dancoff de uma vareta da região 6, por exemplo, será dado por

$$C_6 = \frac{(P_{61} + P_{66} + P_{67}) - P_{66}'}{1 - P_{66}'}. \quad (5.4)$$

5.2.1 Método de Cálculo das Probabilidades de Colisão

Os cálculos efetuados na sub-rotina PIJM são todos em dupla precisão. Na atual versão da sub-rotina, assumem-se apenas ângulos em radianos, e apenas um setor em cada região anular da célula. O número de varetas, seu respectivo raio, distância ao centro da célula e seu ângulo diretor são lidos a partir do arquivo de entrada⁷.

A ordenação das varetas, dentro da mesma região anular, concêntrica à célula, dá-se por ordem crescente do tipo de vareta e não pelo ângulo em relação à direção de referência. Assim, as regiões contidas no cartão RODSUB 1, que contém as informações sobre as varetas de tipo 1, serão numeradas antes das regiões contidas no cartão RODSUB 2, varetas de tipo 2, mesmo que o ângulo diretor do primeiro seja maior que o do segundo. Apenas uma vareta de cada tipo, independente da simetria do problema, é numerada⁸.

A numeração de cada região e sua respectiva área são computadas pela sub-rotina “*region*”. Um índice, necessário para o uso do teorema da reciprocidade, é criado para relacionar o número da região com o número de varetas desse tipo, sendo que as regiões anulares recebem o valor zero.

Após a inicialização das variáveis, as integrações radiais e angulares, o cálculo das distâncias percorridas pelo nêutron em cada região por ele atravessada, a determinação das espessuras ópticas e o cálculo das funções de Bickley são efetuados para as regiões da célula. Num segundo momento, são calculadas as probabilidades de transmissão e o *Black Dancoff factor*. O mesmo procedimento é feito para as regiões de vareta. Terminado o processo de integração, as matrizes de probabilidade são determinadas, e se for o caso, o teorema da reciprocidade é aplicado.

Nessa etapa é feito o teste relativo ao índice que caracteriza os materiais combustíveis, ou seja, qual o tipo de material que compõe a região em questão (1 – combustível, 2 – revestimento e 3 – moderador). Cria-se, um vetor responsável por armazenar as

⁷ Para maiores detalhes consultar apêndice 1.

⁸ Para maiores detalhes consultar figuras 3 e 5 [Anderson, 1973].

probabilidades de autocolisão, P_{ii}' , das regiões de combustível. Após os testes para verificar a necessidade da aplicação do teorema da reciprocidade, os elementos da matriz probabilidade de colisão, P_{ij} , que são regiões de combustível, são separados dos demais.

Então, os fatores de Dancoff com absorção parcial (*Grey Dancoff Factors*) são calculados a partir da Equação (5.3) para cada região de combustível i , usando-se o vetor e os elementos descritos acima, ver Figura 5.3. A rotina efetua esse procedimento para cada valor atribuído à seção de choque macroscópica total do moderador, mantendo as seções de choque do combustível e do revestimento constantes. Posteriormente, os fatores são determinados em função da seção de choque macroscópica total do combustível, forçada a assumir outros valores, enquanto mantêm-se as outras constantes. Dessa forma, os fatores de Dancoff calculados para materiais parcialmente absorvedores convergem para aqueles calculados para materiais perfeitamente absorvedores.

Os valores calculados para a matriz P_{ij} , os fatores de Dancoff para materiais parcialmente e perfeitamente absorvedores, o vetor contendo o tipo de material de cada região (matregi) e outras variáveis são utilizados como dados de entrada na sub-rotina R3. Essa última sub-rotina tem como função aplicar testes de consistência e formatar os dados que serão impressos no arquivo de saída. Os parâmetros de teste eram, originalmente, em função da seção de choque macroscópica do combustível, visto que para a obtenção dos fatores de Dancoff para materiais perfeitamente absorvedores utiliza-se uma seção de choque artificial muito grande, aproximadamente 100 vezes maior que a utilizada para materiais parcialmente absorvedores. Então, modifica-se a rotina de maneira a caracterizar o combustível como sendo toda região que contém material igual a 1 (matregi = 1), e todos os testes passam a ser em função desse vetor.

Conforme se observa na Figura 5.4, testa-se o número de regiões utilizadas para o cálculo dos fatores de Dancoff, bem como os volumes e os materiais das mesmas. Mesmo que haja erros, a sub-rotina segue, sendo esses impressos no arquivo de saída, que por ser demasiado longo não foi incluído neste trabalho. Assim, os resultados são dispostos em gráficos e tabelas apresentados no Capítulo 7.

As Figuras 5.3 e 5.4 são simplificações dos fluxogramas das duas sub-rotinas contendo apenas informações necessárias para o entendimento do modelo utilizado para o cálculo dos fatores de Dancoff para materiais parcialmente absorvedores, desprezando vários processos e testes efetuados ao longo das mesmas.

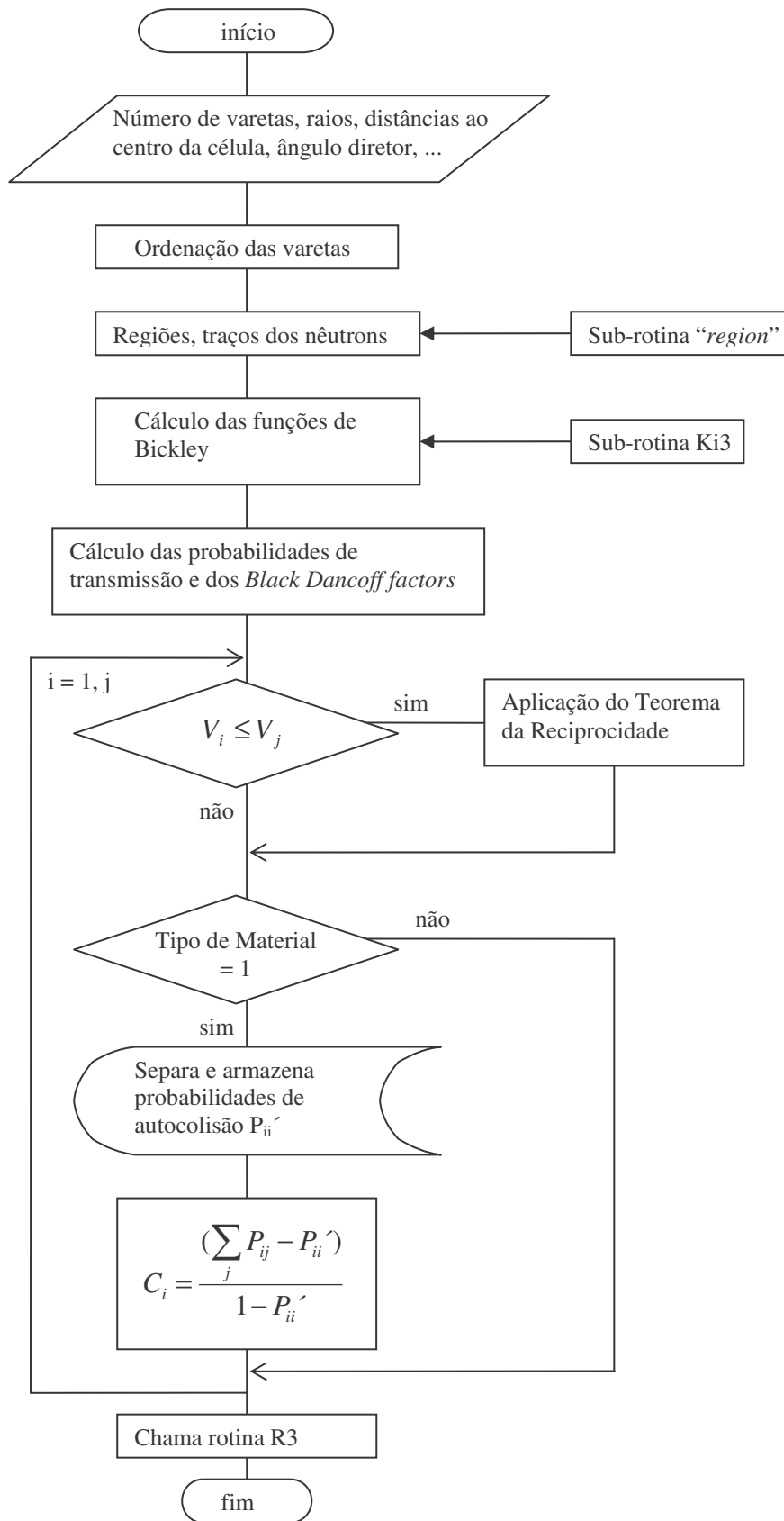


Figura 5.3 – Fluxograma simplificado da sub-rotina PIJM para caracterizar as modificações e o processo de determinação dos fatores de Dancoff com absorção parcial.

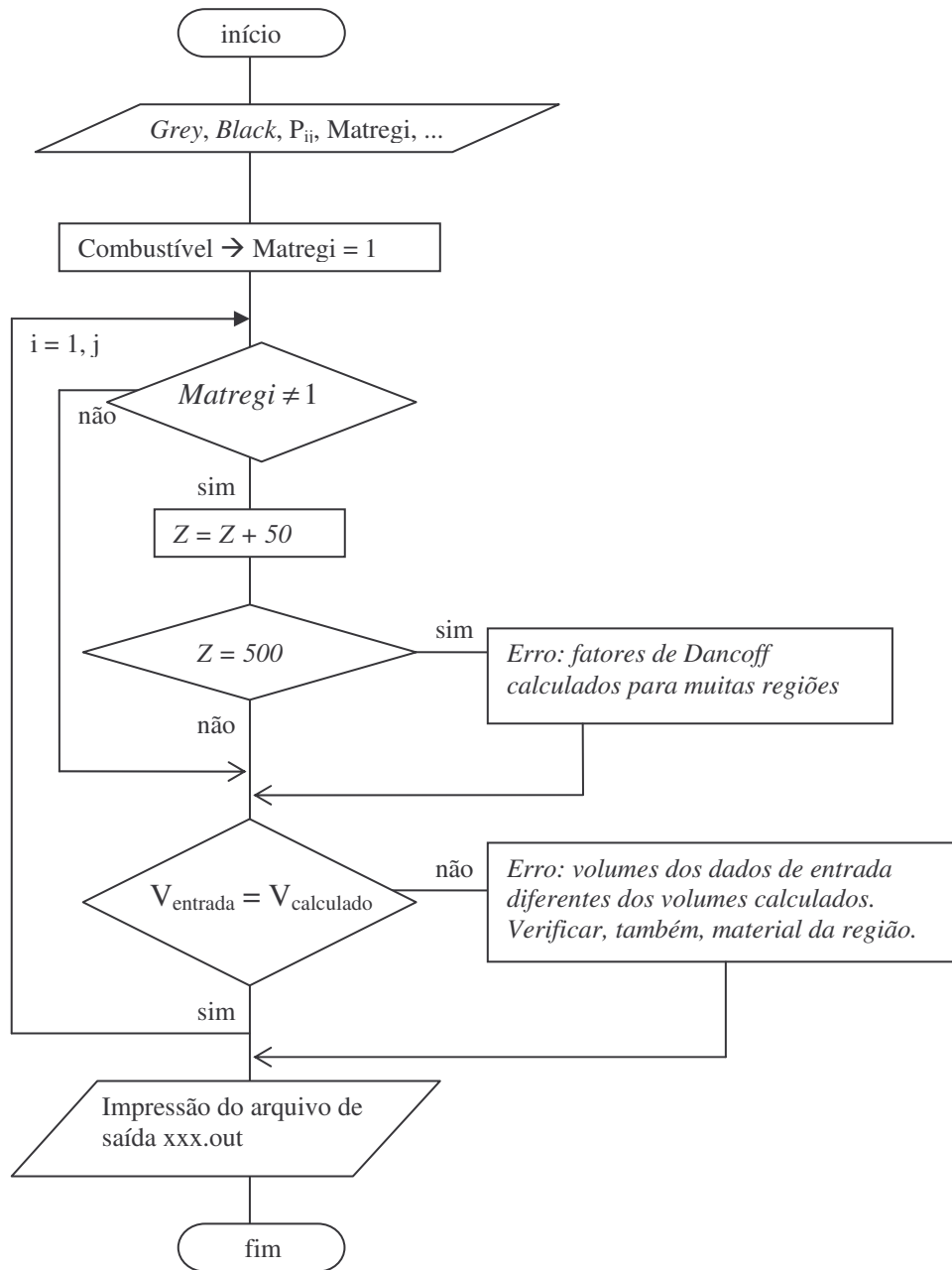


Figura 5.4 – Fluxograma simplificado para caracterizar os testes de consistência impostos pela sub-rotina R3.

5.3 Célula Utilizada

A célula combustível CANDU-37 utilizada nessa simulação é uma das que foram utilizadas por Kim e Cho [Kim e Cho 1999] com 37 varetas combustíveis de UO_2 em arranjos compactos no interior de um tubo de pressão concêntrico a um tubo externo, e separado por uma região de gás, conforme ilustra a Figura 5.3.

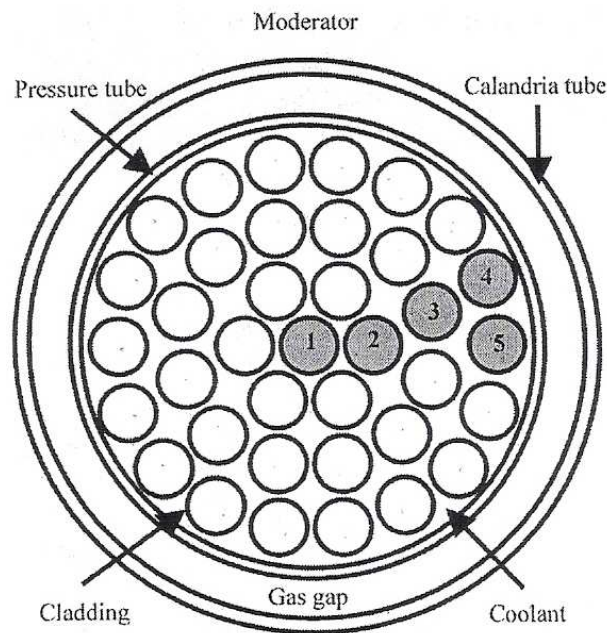


Figura 5.5 – Seção transversal da célula combustível canadense CANDU-37.

O refrigerante, no tubo de pressão, e o moderador, na parte externa da célula, são de água pesada (D_2O). O revestimento das varetas é de zircaloy-4, porém, utilizou-se aqui o valor de $0,25\text{cm}^{-1}$ para a seção de choque macroscópica total do material, a mesma empregada no artigo de referência para comparação [Kim e Cho, 1999]. As demais características da célula estão descritas na Tabela 5.1.

O cálculo de fatores de Dancoff para reatores reais é mais difícil devido à não uniformidade encontrada ao redor das varetas absorvedoras e das barras de controle, ou na irregularidade da localização das varetas combustíveis na célula [Kim e Cho, 1998]. Portanto, na comparação dos métodos, o cálculo dos fatores de Dancoff torna-se mais interessante quando as células utilizadas são do tipo CANDU-37, por possuir varetas irregularmente dispostas, ou do tipo CANFLEX, por possuir varetas com diâmetros diferentes.

Tabela 5.1 – Principais características da célula
combustível utilizada

Características	CANDU-37
Número de varetas (UO ₂)	37
Diâmetro pastilha (cm)	1,220
Dens. Pastilha (g/cm ³)	10,6
Espessura revest. (cm)	0,045
Material revestimento	Zry-4
Varetas do 1º anel:	
Número	6
Dist. ao centro da célula (cm)	1,48845
Ângulo em relação ao eixo de referência (rad)	0
Varetas do 2º anel:	
Número	12
Dist. ao centro da célula (cm)	2,8753
Ângulo em relação ao eixo de referência (rad)	$\pi/12$
Varetas do 3º anel:	
Número	18
Distância ao centro da célula (cm)	4,3307
Ângulo em relação ao eixo de referência (rad)	0
Tubo de pressão (cm):	
Raio interno	5,1689
Raio externo	5,6032
Tubo externo (cm):	
Raio interno	6,4478
Raio externo	6,5875

6 Resultados

O código WIMS foi escrito em Fortran-77, assim como as modificações implementadas apresentadas neste trabalho, sendo compilado num microcomputador pessoal Pentium III 300MHz, com 196MB de memória RAM, utilizando o software *Fortran Lahey 77 Compiler*. O tempo total gasto para calcular as matrizes de probabilidade e os fatores de Dancoff com absorção perfeita e parcial foi de 25,4 minutos, enquanto que pelo método de Monte Carlo se gasta aproximadamente 4 horas. O tempo médio gasto para o cálculo das matrizes para cada seção de choque macroscópica total do refrigerante foi de 3,2 minutos.

Conforme mencionado anteriormente, a consistência do algoritmo computacional utilizado e a lógica de programação foram verificadas comparando-se os resultados obtidos a partir de dados existentes na literatura, particularmente, com aqueles obtidos pelo Método de Monte Carlo [Kim e Cho, 1999].

Os fatores de Dancoff com absorção parcial foram calculados para cinco posições de varetas, ilustradas na Figura 5.5, para a célula do tipo CANDU-37. A seção de choque macroscópica total do combustível utilizada foi de $0,20 \text{ cm}^{-1}$ e a do revestimento de $0,25 \text{ cm}^{-1}$. Na Figura 6.3 apresenta-se o mesmo fator, porém em função da seção de choque macroscópica do combustível, mantendo as seções de choque totais do revestimento e do moderador em $0,25 \text{ cm}^{-1}$ e $0,30 \text{ cm}^{-1}$, respectivamente.

Para os fatores de Dancoff de células cilíndricas em geometria cluster, assumindo absorção perfeita no combustível, nos casos de redes regulares de varetas, existem valores precisos na literatura. No entanto, não há registro de valores para os fatores de Dancoff com absorção parcial, ficando a análise restrita somente à parte gráfica. Não obstante, optou-se por apresentá-los na Tabela 6.1, visando à comparação mais detalhada em trabalhos futuros.

Tabela 6.1 – Valores dos fatores de Dancoff, com absorção parcial, encontrados para cada posição em função da variação da seção de choque total do moderador, Σ_M , para células do tipo CANDU-37.

Σ_M	Posições				
	P1	P2	P3	P4	P5
0	0,414381	0,405885	0,355087	0,259868	0,259792
0,2	0,338953	0,321007	0,279161	0,196110	0,195026
0,3	0,310481	0,289414	0,251322	0,174194	0,172618
0,4	0,286101	0,262709	0,227914	0,156368	0,154338
0,6	0,246358	0,220092	0,190686	0,129140	0,126331
0,8	0,215225	0,187734	0,162404	0,109343	0,105914
1	0,190122	0,162466	0,140215	0,094307	0,0903928
1,2	0,169428	0,142285	0,122373	0,082497	0,0782078

O gráfico da Figura 6.1 foi construído a partir dos dados contidos na Tabela 6.1, enquanto o gráfico da Figura 6.2 representa os valores obtidos pelo Método de Monte Carlo [Kim e Cho, 1999]. Com vistas a uma análise mais precisa na comparação entre os gráficos, optou-se por atribuir a unidade secundária igual a 0,05 no eixo vertical, referente aos fatores de Dancoff para materiais parcialmente absorvedores. Apesar do gráfico de referência não possuir a mesma divisão, fica evidente que os dados obtidos a partir da sub-rotina PIJM pelo método direto se mostram muito próximos daqueles apresentados na Figura 6.2 obtidos por Monte Carlo.

Cabe lembrar que as equações utilizadas para determinar as probabilidades de colisão são exatas, sujeitas apenas a erros de truncamento e arredondamento oriundos do método numérico de integração utilizado. Em estudo anterior [Bogado, 2000], mostrou-se que a técnica de integração utilizada em PIJM oferece valores precisos para o cálculo das probabilidades de colisão, apresentando pequenos erros. Utilizou-se 64 pontos de quadratura nas integrais radiais e 128 intervalos nas integrais angulares.

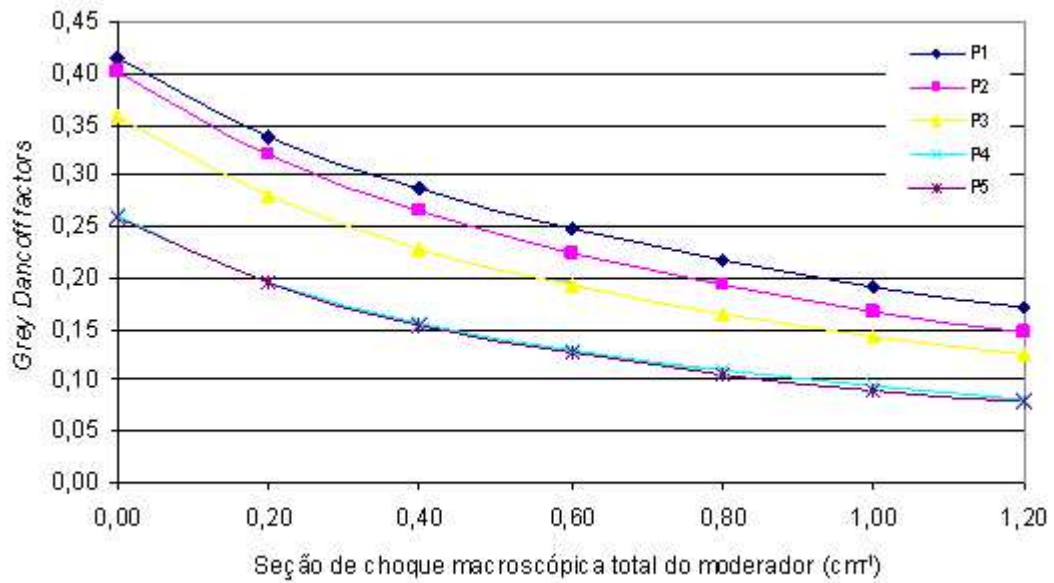


Figura 6.1 – Fatores de Dancoff com absorção parcial em função da seção de choque macroscópica total do moderador, assumindo que as seções de choque do combustível e do revestimento são, respectivamente, $0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$.

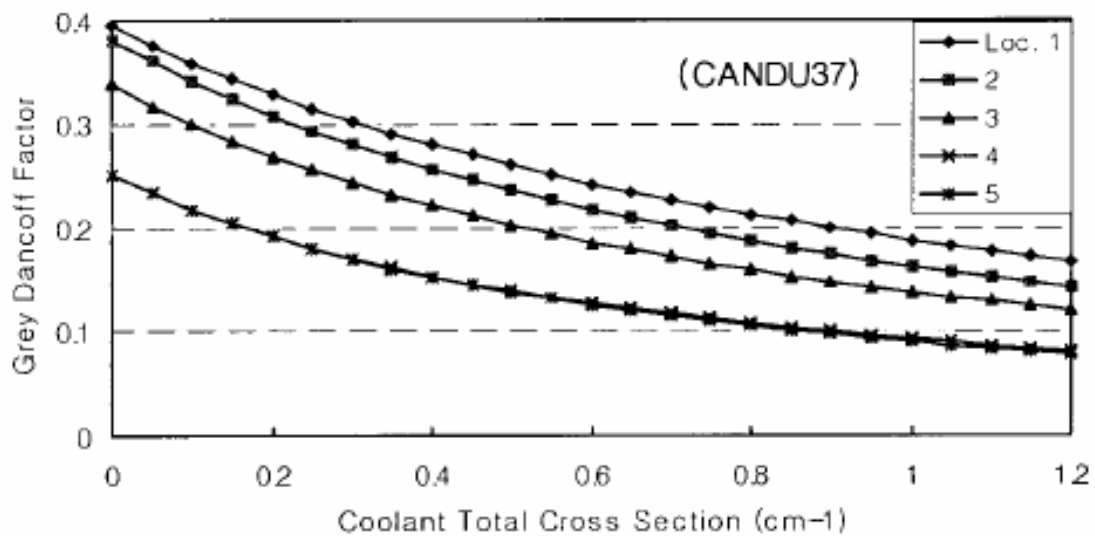


Figura 6.2 – Fatores de Dancoff com absorção parcial em função da seção de choque macroscópica total do moderador, assumindo que as seções de choque do combustível e do revestimento são, respectivamente, $0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Kim e Cho, 1999].

Na figura abaixo se observa o comportamento dos fatores de Dancoff em função da seção de choque macroscópica total do combustível. Quando se aumenta, artificialmente, essa seção de choque, deseja-se que os valores dos fatores de Dancoff calculados para materiais parcialmente absorvedores convirjam para os valores dos fatores de Dancoff calculados para materiais perfeitamente absorvedores.

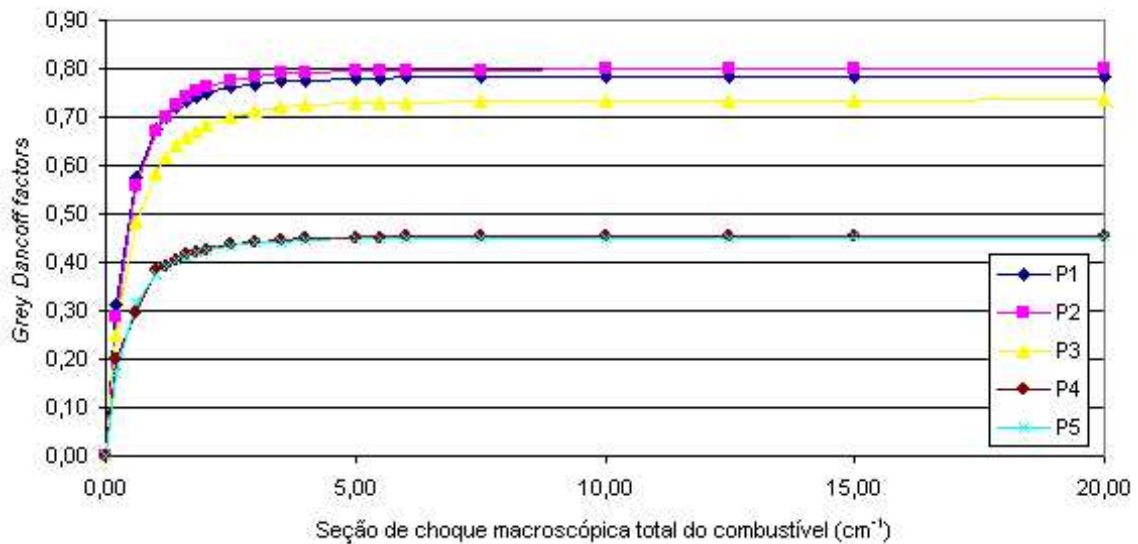


Figura 6.3 – Fatores de Dancoff com absorção parcial em função da seção de choque macroscópica total do combustível, assumindo que as seções de choque do moderador e do revestimento são, respectivamente, $0,3 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$.

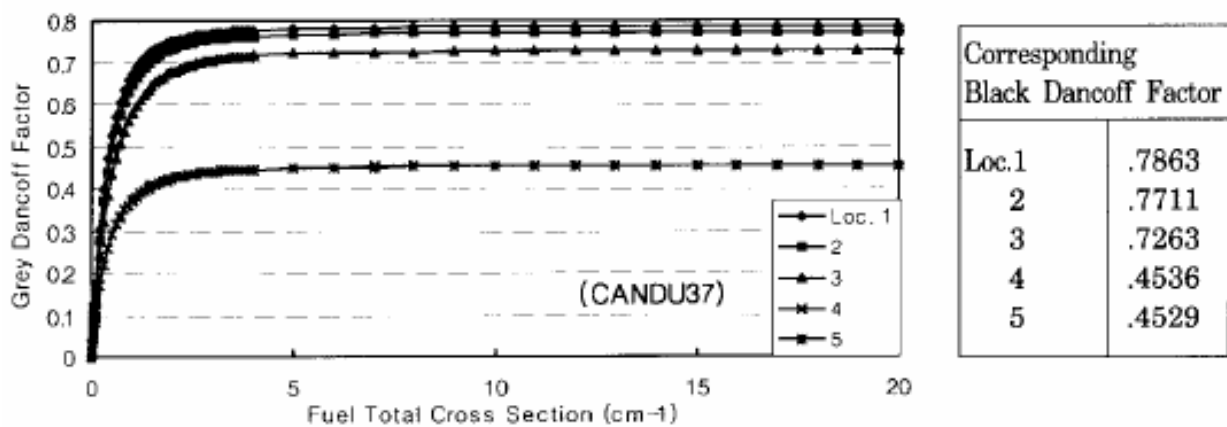


Figura 6.4 – Fatores de Dancoff com absorção parcial em função da seção de choque macroscópica total do combustível, assumindo que as seções de choque do moderador e do revestimento são, respectivamente, $0,3 \text{ cm}^{-1}$ e $0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Kim e Cho, 1999].

As diferenças relativas para os *Black Dancoff factors* entre os valores calculados e aqueles obtidos pelo método de Monte Carlo, ver Tabela 6.2, ficaram entre 0,13% e 3,63%.

Tabela 6.2 – Valores dos *Black Dancoff factors* correspondentes para cada posição em função da variação da seção de choque total do combustível obtidos neste trabalho e pelo Método de Monte Carlo [Kim e Cho, 1999], e diferenças relativas.

	P1	P2	P3	P4	P5
Este Trabalho	0,785	0,799	0,736	0,454	0,452
Monte Carlo	0,786	0,771	0,726	0,454	0,453
Diferença relativa (%)	0,127	3,632	1,377	0,439	0,221

Observando a Tabela 6.3, percebe-se que os valores determinados em [Bogado et al., 2004b] estão muito próximos daqueles obtidos neste trabalho, ficando as diferenças relativas entre 0,00% e 2,17%. Assim, corrobora-se a demonstração feita em [Carlvik, 1967], ou seja, para materiais perfeitamente absorvedores a definição original, que corrige a corrente de nêutrons incidente na superfície da vareta em questão pela presença de outras varetas, tende à definição alternativa, que corrige a probabilidade de escape do combustível devido aos demais combustíveis no meio.

Tabela 6.3 – Valores dos *Black Dancoff factors* correspondentes para cada posição em função da variação da seção de choque total do combustível obtidos neste trabalho e em [Bogado, 2004b], e diferenças relativas.

	P1	P2	P3	P4	P5
Este Trabalho	0,785	0,799	0,736	0,454	0,452
[Bogado et al., 2004b]	0,786	0,782	0,747	0,454	0,452
Diferença relativa (%)	0,127	2,174	1,473	0,000	0,0000

8 Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, um método probabilístico analítico para o cálculo dos fatores de Dancoff para materiais parcialmente absorvedores foi proposto para o código WIMS, resultando na modificação da sub-rotina PIJM. Utilizando-se a definição alternativa, esse fator foi calculado para 5 posições distintas de uma célula combustível do tipo CANDU-37.

O método consiste em, após o cálculo da matriz probabilidade de colisão para todas as regiões da célula, considerar apenas aquelas que são regiões de combustível. Assim, o fator de Dancoff com absorção parcial da região i será dado pelo somatório das probabilidades de colisão, P_{ij} , para um nêutron, oriundo de uma região combustível do tipo i , ser absorvido em outra região combustível j sem sofrer colisão no revestimento ou no moderador.

Devido à inexistência de registro de valores para os *Grey Dancoff factors*, a análise dos resultados foi totalmente gráfica. A partir da comparação dos gráficos percebe-se que os dados obtidos pelo método probabilístico analítico encontram-se bem próximos daqueles gerados pelo método probabilístico estocástico de Monte Carlo, podendo-se, assim, considerá-los satisfatórios. Um fato que merece destaque é o tempo computacional, o qual ficou em torno de 25 minutos, bem menor que o tempo gasto pelo método de Monte Carlo.

Como sugestão para trabalhos futuros, propõe-se estender o cálculo feito para células bidimensionais com contornos externos cilíndricos, pela técnica probabilística, e para células quadradas, por ambas as técnicas direta e probabilística de cálculo, de modo a permitir a comparação dos resultados. Para o cálculo dos fatores de Dancoff em células quadradas, além das modificações inerentes à geometria da região mais externa, o modelo precisará considerar, explicitamente, as reflexões dos traços na superfície da célula (reflexão especular), uma vez que a condição de reflexão difusa, “*white*”, adotada no cálculo das probabilidades de colisão em células com contornos externos cilíndricos, não mais se aplica neste caso, conforme ilustrado na Figura 4.1(b).

Outra sugestão seria rever o cálculo das integrais de ressonância e da criticalidade do código WIMS em geometria cluster, em termos dos fatores calculados. Isso permitiria avaliar os efeitos das variações dos fatores de Dancoff no fator de multiplicação, κ , das células e discutir os modelos de integrais de ressonância de varetas combustíveis, utilizados nessa geometria.

Em ambas as sugestões, deve-se enfatizar o desenvolvimento de módulos computacionais portáteis, que permitam fácil adaptação desses a outros códigos de cálculo de células unitárias.

Referências Bibliográficas

Anderson, D. W., 1973. “**The WIMS ‘E’ Module W-PIJ: A Two-Dimensional Collision Probability Code with General Boundary Conditions**”. AEEW – R862.

Barros, R., 2007. Material utilizado no curso “**Condições de Contorno do tipo Albedo**”, ministrado no Instituto de Matemática da UFRGS, 09, 10 e 11 de janeiro de 2007.

Blair, J. M., Edwards, C. A., Johnson, J.H., 1978. “Rational Chebyshev Approximations for the Bickley Functions, $K_i(x)$ ”, **Mathematics of Computation**, Vol. 32 (143), pp. 876–886.

Bogado Leite, S. Q., 2000. “Improvements in Calculating Collision Probabilities in Cluster Geometry”, **Kerntechnik**, Vol. 65 (5-6), pp. 245–249.

Bogado Leite, S. Q., 2003. “Determinação de Probabilidades de Colisão em Geometria Cluster pelo Método de Monte Carlo”, **Revista Brasileira de Pesquisa e Desenvolvimento**, Vol. 5 (1).

Bogado Leite, S. Q., Zabadal; J. R. S., Vilhena, M. T., 2004a. “Improved Dancoff Factors for Cluster Fuel Bundles by the WIMSD Code”, **Kerntechnik**, Vol. 69 (3), pp. 79–83.

Bogado Leite, S. Q., Zabadal; J. R. S., Vilhena, M. T., 2004b. “Fatores de Dancoff em Geometria Cluster pelo Método de Monte Carlo e Comparações com o Método Direto”, **Revista Brasileira de Pesquisa e Desenvolvimento**, Vol. 6 (3).

Carlvik I., 1967. “The Dancoff Correction in Square and Hexagonal Lattices”, **Nuclear Science and Engineering**, Vol. 29, pp. 325–336.

Chapman, S. J., 1998. “**Fortran 90/95: for scientists and engineers**”. Boston: McGraw-Hill.

Dancoff, S. M.; Ginsburg, M., 1944. “**Surface Resonance Absorption in a Close-Packed Lattice**”, CP-2157.

Eisberg, R.M., 1979. “**Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas**”, Rio de Janeiro: Campus.

ELETRONUCLEAR – Eletrobrás Termonuclear S/A. Disponível em: <<http://www.eletronuclear.gov.br>>. Acesso em: fevereiro de 2007.

Ellis, T.M.R., 1994. “**Fortran 90 Programming**”. Wokingham: Addison-Wesley.

ESVA – Emilio Segrè Visual Archives. Disponível em: <<http://photos.aip.org>>. Acesso em: fevereiro de 2007.

Glasstone, S., Bell, G. I., 1970. “**Nuclear Reactor Theory**”, New York: Van Nostrand Company.

Halsall, M. J., 1980. “**A Summary of WIMSD4 Input Options**”. AEEW – M1327.

How Stuff Works. Disponível em: <<http://www.howstuffworks.com>>. Acesso em: fevereiro de 2007.

Kim, H. H.; Cho, N. Z., 1999. “Criticality Calculation for Cluster Fuel Bundles Using Grey Dancoff Factor”, **Annals of Nuclear Energy**, Vol. 26, pp. 803–820.

Kowalska, K., 1972. “**S-WIMS Manual**”, NEA Data Bank.

Lamarsh, J. R., 1966. “**Introduction to Nuclear Reactor Theory**”. Reading, Mass.: Addison-Wesley.

Nordheim, L. W., 1962. “A New Calculation of Resonance Integrals”, **Nuclear Science and Engineering**, Vol. 12, pp. 457–463.

US DOE – United States Department of Energy. Disponível em: <<http://ma.mbe.doe.gov/me70/history/photos.htm>>. Acesso em: fevereiro de 2007.

Wigner, E. P., Creutz, E., Jupnik, H., e Snyder, T., 1955. “Resonance Absorption of Neutrons by Spheres”, **Journal of Applied Physics**, Vol. 26 (3), pp. 260–270.

Apêndice I

Arquivo de entrada de dados para CANDU-37

```

*
CELL 7
SEQUENCE 4
NMESH 35
NGROUP 6 2 2
NMATERIAL 11 3
NREGION 10 3
NREACT 8
NRODS 36 1 64 128 3 2 1
PREOUT
INITIATE
* wimsd CANDU-37
* 37 pin cluster
FEWGROU 5 14 27 45 55 69
MESH 3 1 2 2 2 2 1 1 1 20
DANCOFF      .209618      .363963      15 $
              .209229      .363652      16 $
              .211657      .365602      17 $
              .203305      .358896      18 $
              .199864      .356133      19 $
              .201663      .357577      20 $
              .205586      .360727      21 $
              .201043      .357079      22 $
              .201196      .357202      23 $
              .201284      .357273      24 $
              .201360      .357334      25 $
              .201423      .357385      26 $
              .201517      .357461      27 $
MATERIAL 1 0.807859 561.16 3 4001 .03 16 79.906 4002 20.063 * Coolant
hydrogen+oxigen ----
MATERIAL 2 6.5041 342.16 4 91 100. * Pressure Tube          ----
MATERIAL 3 0.0014 342.16 4 4001 11.1111 16 88.8889 * Gap      -----
MATERIAL 4 6.4003 342.16 4 91 98.2083 1056 0.135 52 0.1 58 0.055 * Calandria
Tube          -----
MATERIAL 5 5.8728 561.16 2 91 98.1813 1056 0.21 52 0.1 58 0.007 * Clad -----
MATERIAL 6 1.085 342. 4 4001 .03 16 79.906 4002 20.063 * Moderator -----
MATERIAL 7 10.4056 960.16 1 235.4 0.6267 2238.4 87.5211 16 11.8523 * fuel
MATERIAL 8 10.4056 960.16 1 235.4 0.6267 2238.4 87.5211 16 11.8523 * fuel
MATERIAL 9 10.4056 960.16 1 235.4 0.6267 2238.4 87.5211 16 11.8523 * fuel
MATERIAL 10 .54 554. 4 4001 11.1111 16 88.8889 * water
MATERIAL 11 -1 339.0 4 16 0.001

```

```

ANNULUS 1 0.610 7 * central fuel
ANNULUS 2 0.655 5 * can
ANNULUS 3 0.74 1 * coolant
ANNULUS 4 2.18 1 * coolant
ANNULUS 5 3.61 1 * coolant
ANNULUS 6 5.1689 1 * coolant
ANNULUS 7 5.6032 2 * Pressure Tube
ANNULUS 8 6.4478 3 * Gap
ANNULUS 9 6.5875 4 * Calandria
POLYGON 10 4 6 14.2875
RODSUB 1 1 0.610 7 * fuel
RODSUB 1 2 0.655 5 * can
RODSUB 2 1 0.610 8 * fuel
RODSUB 2 2 0.655 5 * can
RODSUB 3 1 0.610 9 * fuel
RODSUB 3 2 0.655 5 * can
ARRAY 1 (1 6 1.48845 0) * inner fuel
ARRAY 2 (1 12 2.8753 0.2618) * middle fuel
ARRAY 3 (1 18 4.3307 0) * outer fuel
TESTPRINTS
SUPPRESS 1 1 0 1 1 1 1 0 1 1 1 0 1 0 0 1
*SUPPRESS 1 0 0 0 1 1 0 1 1 1 1 1 1 0 1 * (OUTPUT TOO LONG)
PIJDANCOFF 5
NPIJAN 6 10 0
BEGINC
SPU
LEAKAGE 5
DIFFUSION 2 1 1
BEEONE 1
BUCKLING 0.412E-04 .268E-04 0.412E-05 .268E-05
THERMAL 2
BEGINC

```

Apêndice II

Definições e conceitos importantes

Abaixo, apresentam-se alguns conceitos, citados ao longo do texto, e definições que merecem destaque, evitando-se que assuntos paralelos dispersem o texto principal.

II.1 O nêutron como uma partícula pontual

Os nêutrons, assim como outras formas de matéria, exibem propriedades ondulatórias e corpusculares. Na teoria de transporte, consideramos o nêutron uma partícula pontual, isto é, ele pode ser descrito completamente através de sua posição e velocidade.

De acordo com de Broglie, o comprimento de onda reduzido de uma partícula é dado pela relação

$$\lambda = \frac{h}{2\pi p_n} = \frac{\hbar}{p_n}, \quad (\text{II.1})$$

onde h é a constante de Plank ($6,63 \cdot 10^{-34}$ Js) e p é o *momentum* da partícula. Para um nêutron com energia da ordem de 0,01 eV ($1,602 \cdot 10^{-21}$ J), $\lambda = 4,55 \cdot 10^{-9}$ cm. Ou seja, para baixas energias, o comprimento de onda do nêutron é comparável às distâncias internucleares numa rede cristalina. Os efeitos de interferência que poderiam ocorrer entre os nêutrons e os núcleos não são significativamente importantes para a teoria de reatores.

Os nêutrons possuem momento magnético e spin ocasionando efeitos de polarização. Contudo, nenhum desses efeitos é importante no transporte de nêutrons dentro do reator. Quando

necessário, é feita uma pequena modificação nas seções de choque utilizadas na equação de transporte. Aqui, esses ajustes não se farão necessários.

Podemos escolher valores, para o *momentum* e a posição do nêutron, suficientemente precisos que não violem o Princípio da Incerteza de Heisenberg, $\Delta x \Delta p \geq \hbar$. Por exemplo, uma incerteza $\Delta x = 10^{-4}$ cm na posição, corresponde a uma incerteza no *momentum* de $1,06 \cdot 10^{-27}$ kg m/s, levando a uma desprezível incerteza na energia, isto é, $\Delta E \sim 10^{-5} \sqrt{E}$, onde ΔE e E estão em eV. Isso significa que se pode adotar o modelo corpuscular sem perdas significativas devido à incerteza em parâmetros dos nêutrons que se utiliza neste estudo.

II.2 Seções de choque

As interações entre nêutrons e matéria são descritas em função das *seções de choque*. Neste trabalho, as seções de choque utilizadas serão as macroscópicas, para as quais será dado um enfoque maior.

II.2.1 Seções de choque microscópicas

Podem ser entendidas como a área virtual que um núcleo apresenta para que um determinado tipo de reação nuclear ocorra, isto é, está relacionada com a probabilidade por núcleo que um nêutron irá interagir de alguma forma com este. Sua unidade é o barn [b], que equivale a 10^{-24}cm^2 .

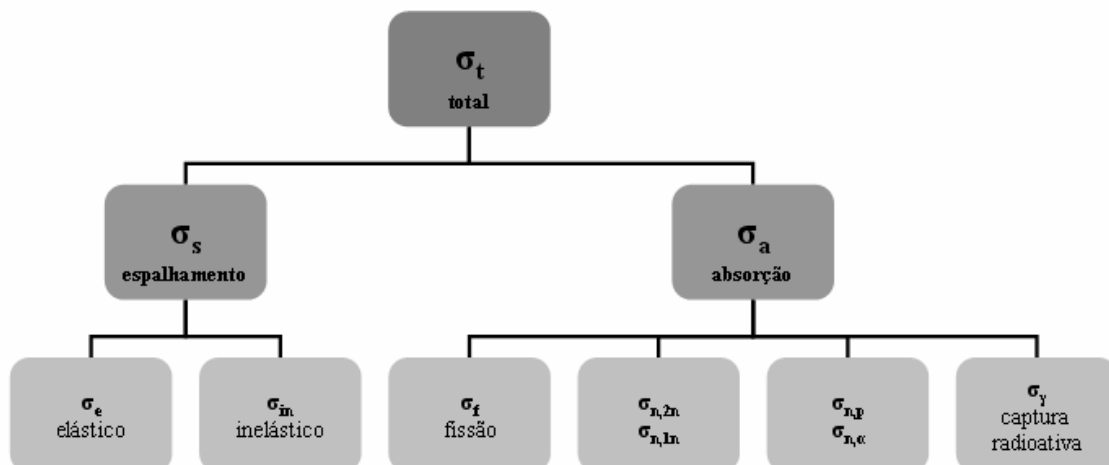


Figura II.1 – Esquema “hierárquico” das seções de choque microscópicas.

II.2.2 Seções de choque macroscópicas

São definidas como o produto da seção de choque microscópica do núcleo, σ , para que certa reação ocorra, pela densidade volumétrica, D_n , de número de isótopos presentes no meio, para neutros de um determinado grupo de energia,

$$\Sigma(r, E) = D_n \sigma, \quad (\text{II.2})$$

Também podemos relacioná-la com a probabilidade de um nêutron migrar num meio composto por núcleos e sofrer um determinado tipo de reação. Sendo as unidades dos fatores (número de isótopos)/cm³ e cm², respectivamente, a unidade do produto, a seção de choque macroscópica, será o cm⁻¹. Quanto maior ela for, menor será a distância média percorrida pelo nêutron até que a reação ocorra. Chamamos esta distância de livre caminho médio,

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma(r, E)}. \quad (\text{II.3})$$

A seção de choque macroscópica total, $\Sigma_t(r, E)$, é a soma das seções de choque parciais para todos os tipos possíveis de interações nêutron-núcleo, isto é,

$$\Sigma_t(r, E) = \Sigma_s(r, E) + \Sigma_a(r, E), \quad (\text{II.4})$$

onde os índices s e a representam, respectivamente, espalhamento e absorção.

II.3 O efeito Doppler

A energia disponível para uma interação núcleo-nêutron é a soma de suas respectivas energias cinéticas com relação a seus centros de massa,

$$E_c = \frac{1}{2} \mu v_r^2, \quad (\text{II.5})$$

onde μ é a massa reduzida das partículas, dada por

$$\mu = \frac{mM}{m + M}, \quad (\text{II.6})$$

onde m é a massa do nêutron e M a massa do núcleo, e v_r é o módulo da velocidade relativa de aproximação. Se \vec{v}_r é igual à velocidade do nêutron, no sistema referencial de laboratório, o núcleo está em repouso. Caso contrário, o núcleo está em movimento e \vec{v}_r pode ter uma gama de valores. A relação entre os vetores velocidade é a dada por:

$$\vec{v}_r = \vec{v}_{\text{nêutron}} - \vec{V}_{\text{núcleo}} \quad (\text{II.7})$$

Assim, \bar{v}_r é maior para o caso apresentado na Figura II.2(a), onde as duas partículas se aproximam e o *momentum* total é nulo, do que para o caso na Figura II.2(b) onde o nêutron “persegue” o núcleo e o *momentum* total é diferente de zero. Salienta-se que a figura abaixo é meramente ilustrativa, visto que o movimento térmico do núcleo pode ter qualquer direção.

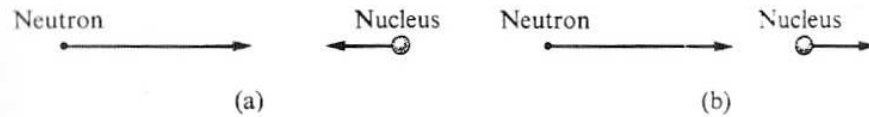


Figura II.2 – Movimentos do nêutron e do núcleo. [Lamarsh, 1966].

Esse movimento do núcleo, chamado de movimento térmico, pode afetar significativamente a dependência da seção de choque em função da energia na vizinhança da ressonância, mesmo que as velocidades dos nêutrons sejam muito maiores que as dos núcleos.

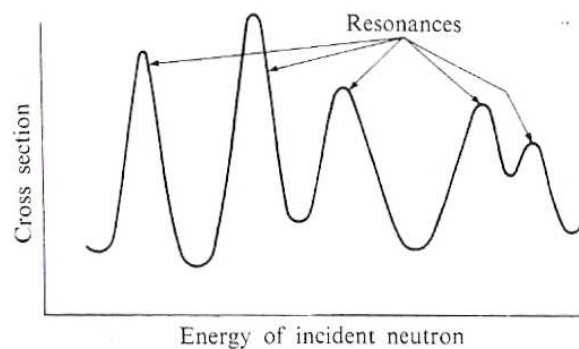


Figura II.3 – Ressonâncias na seção de choque Σ em função da energia do nêutron incidente [Lamarsh, 1966].

A seção de choque de absorção dos núcleos quando colocada em função da energia, apresenta vários picos próximos uns aos outros, como mostrado na Figura II.3. Todavia, devido ao aumento do movimento térmico dos núcleos, ocorre um achatamento destes picos, alargando a banda de energia que um nêutron pode ser capturado por ressonância, Figura II.4. O aumento da temperatura provoca uma absorção adicional nas regiões cuja probabilidade de captura era bastante baixa anteriormente.

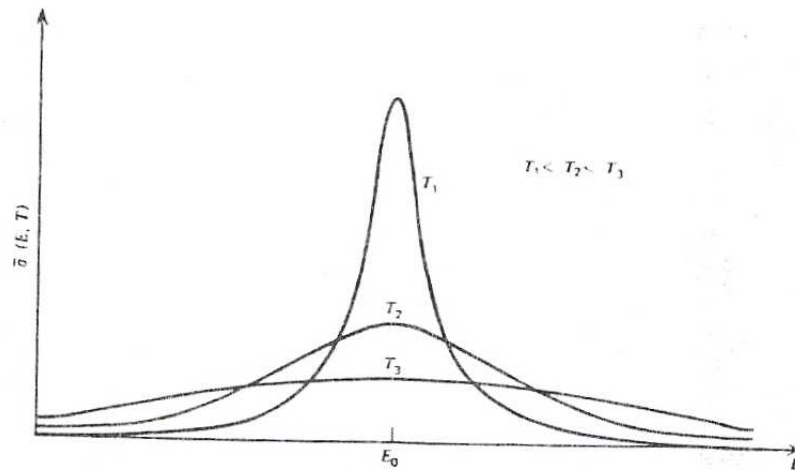


Figura II.4 – Achatamento Doppler devido ao aumento da temperatura dos núcleos absorvedores [Barros, 2007].

II.4 Fator de multiplicação efetivo – κ

Um núcleo com elevado número de prótons, Z , ao fissionar-se em dois núcleos com Z intermediários, libera energia e , em média, 2 nêutrons, que induzirão outros núcleos à fissão num processo de reação em cadeia. Através da Figura II.5 abaixo, onde se representa a curva de estabilidade, tem-se uma noção de como isso acontece.

Os fragmentos da fissão não são, em geral, simétricos, contudo, possuem aproximadamente a mesma razão,

$$\frac{Z}{N}, \quad (\text{II.8})$$

que o núcleo que lhes deu origem, onde N é o número de nêutrons. Assim como seus números de massa atômica, $A = Z+N$, possuem valores bem menores que o do núcleo de origem, haverá um excesso de nêutron nesses fragmentos, os quais serão liberados, na região dos 0,5 MeV, por uma sucessão de decaimentos β . São os chamados nêutrons retardados, de vital importância para o controle efetivo da reação de fissão em cadeia. Parte do decaimento do núcleo composto que se fissiona ocorre através da liberação de 2 ou 3 nêutrons com aproximadamente 2MeV de energia cinética cada um. São os chamados nêutrons prontos que aparecem, aproximadamente, 10^{-17} s após a fissão.

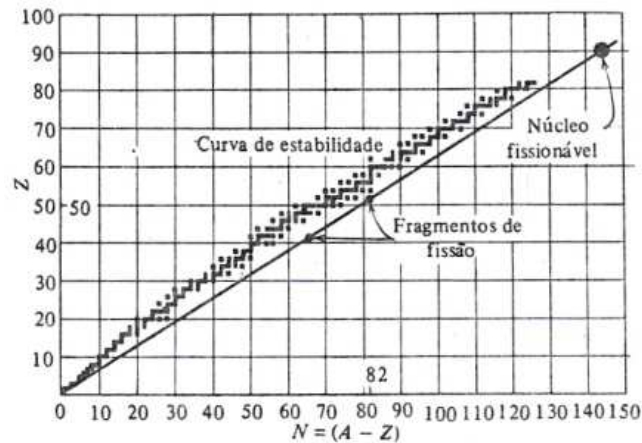


Figura II.5 – Tendência que os fragmentos de fissão têm de possuírem um número excessivo de nêutrons [Eisberg, 1979].

Como exemplo, considera-se o fragmento de fissão $^{87}_{35}\text{Br}$, emissor de elétrons. Esse núcleo decai eventualmente num estado de seu núcleo filho $^{87}_{36}\text{Kr}$, o qual é suficientemente excitado para provocar a emissão de um nêutron formando o núcleo estável $^{86}_{36}\text{Kr}$. Os nêutrons emitidos nesse processo têm um atraso característico igual à meia-vida do isótopo, nesse caso 55s.

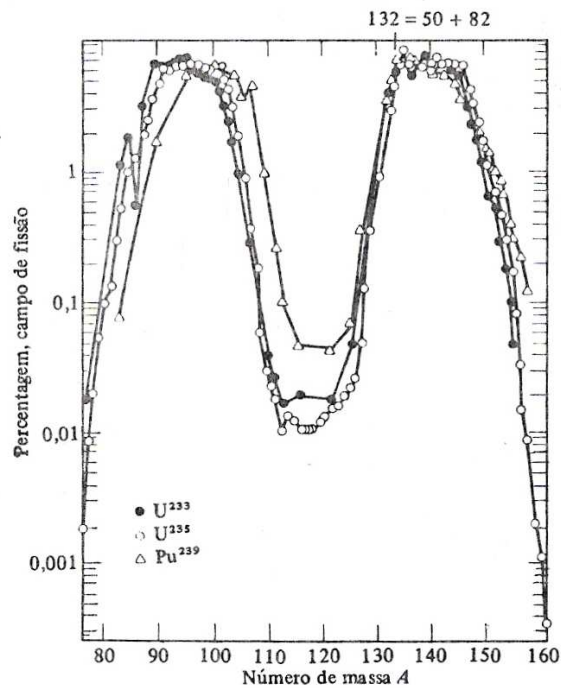


Figura II.6 – Espectro de massa dos fragmentos produzidos na fissão do ^{233}U , ^{235}U e ^{239}Pu quando induzida por nêutrons de baixa energia [Eisberg, 1979].

Nos reatores nucleares que utilizam água pesada, D_2O , como moderador, tem-se uma fonte adicional de nêutrons retardados a partir da interação dos raios gama, ou seja,



Os nêutrons liberados nesse processo recebem a denominação de fotonêutrons.

Para que a reação em cadeia se mantenha estável, deve-se ter um balanço entre a produção de nêutrons (fissão) e a remoção deles (captura e fuga). O fator de multiplicação efetivo, κ , é definido como a razão entre o número de nêutrons em uma geração, N_2 , e o número de nêutrons na geração precedente, N_1 ,

$$\kappa = \frac{N_2}{N_1}. \quad (\text{II.10})$$

De maneira prática, pode ser definido como sendo razão entre as taxas de produção e perda de nêutrons no reator.

Os cálculos formais de κ são apresentados para reatores nucleares do tipo térmico, que é o caso do PWR, onde reações de fissão em cadeia ocorrem com nêutrons de baixa energia cinética ($E_c \approx 0,025eV$).

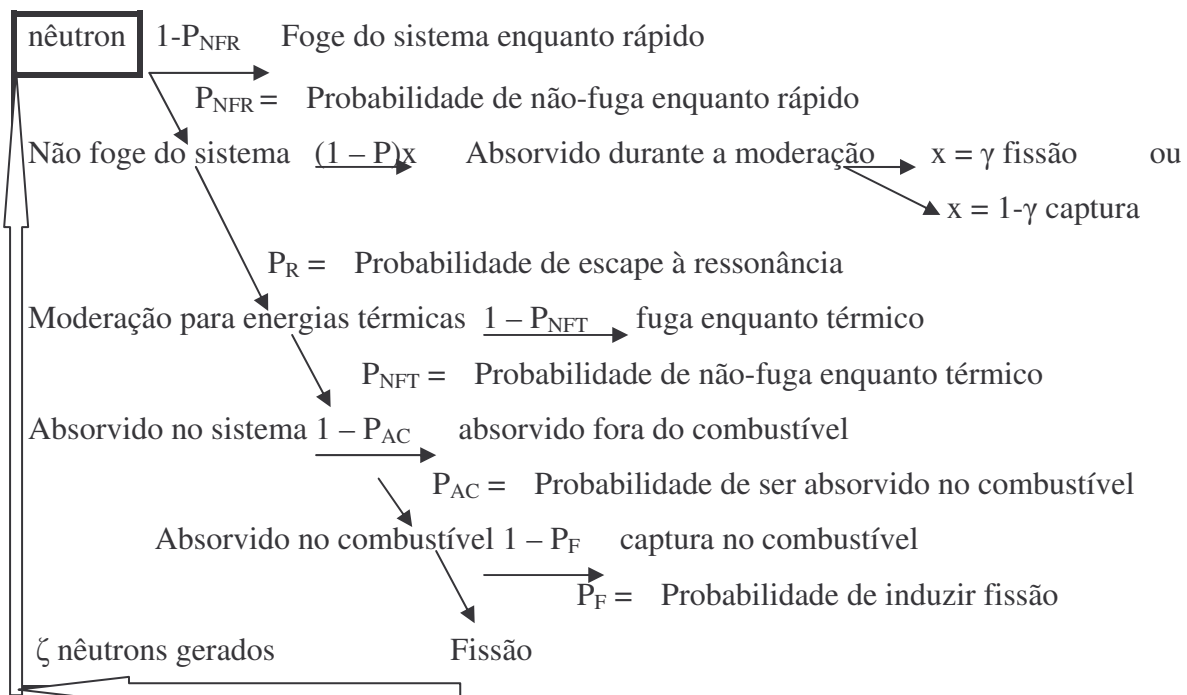


Figura II.7 – Ciclo do nêutron [Barros, 2007].

Na equação apresentada abaixo, o primeiro termo da adição refere-se aos nêutrons gerados por fissão térmica, e o segundo termo aos nêutrons gerados por fissão rápida, ver Figura II.7.

$$N_2 = \xi P_{NFR} P_R P_{NFT} P_{AC} P_F N_1 + P_{NFR} (1 - P) \gamma N_1 \quad (\text{II.11})$$

Utilizando-se a Equação (II.10) e sabendo que $\eta = \xi P_F$, onde η é o número de nêutrons produzidos no combustível, temos

$$\kappa = P_{NFR} P_R P_{NFT} P_{AC} \eta + P_{NFR} (1 - P) \gamma. \quad (\text{II.12})$$

Reescreve-se a equação acima de maneira mais elegante definindo uma quantidade ε , como sendo a razão entre o número provável de nêutrons rápidos provenientes de fissão rápida e térmica e o número provável de nêutrons rápidos provenientes de fissão térmica. Então,

$$\begin{aligned} \kappa &= P_{NFR} P_R P_{NFT} P_{AC} \eta \left[1 + \frac{P_{NFR} (1 - P) \gamma}{P_{NFR} P P_{NFT} P_{AC} \eta} \right] \\ \kappa &= P_{NFR} P_R P_{NFT} P_{AC} \eta \left[\frac{P_{NFR} P P_{NFT} P_{AC} \eta + P_{NFR} (1 - P) \gamma}{P_{NFR} P P_{NFT} P_{AC} \eta} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

O termo entre os colchetes na Equação (II.12) é a quantidade definida no parágrafo acima. Conseqüentemente,

$$\kappa = P_{NFR} P_R P_{NFT} P_{AC} \eta \varepsilon. \quad (\text{II.14})$$

Num meio infinito, não há fuga de nêutrons, portanto,

$$\kappa_\infty = P_R P_{AC} \eta \varepsilon. \quad (\text{II.15})$$

Alternativamente, pode-se utilizar mais uma definição antes de chegarmos às duas equações na sua forma final. O fator de utilização térmica, f , fornece a eficiência com a qual o reator utiliza os nêutrons térmicos no combustível, isto é,

$$f = P_{AC} \quad (\text{II.16})$$

Assim, chega-se à fórmula dos 6 fatores,

$$\kappa = P_{NFR} P_R P_{NFT} f \eta \varepsilon, \quad (\text{II.17})$$

e à fórmula dos 4 fatores,

$$\kappa_\infty = P_R f \eta \varepsilon. \quad (\text{II.18})$$

II.4.1 Modelo simples da cinética das reações em cadeia

Num instante t temos $N(t)$ nêutrons presentes em um reator. A taxa de variação do número de nêutrons no reator com relação ao tempo será dada por

$$\frac{dN(t)}{dt}, \quad (\text{II.19a})$$

ou seja, o balanço entre a taxa de produção, $H(t)$, e a taxa de perda, $L(t)$,

$$\frac{dN(t)}{dt} = H(t) - L(t). \quad (\text{II.19b})$$

A partir da definição de κ , feita anteriormente, escreve-se

$$\kappa = \frac{H(t)}{L(t)}; \quad (\text{II.19c})$$

logo,

$$\frac{dN(t)}{dt} = (\kappa - 1)L(t) \quad (\text{II.19d})$$

Definindo o tempo de vida do nêutron como

$$l \equiv \frac{N(t)}{L(t)}, \quad (\text{II.20})$$

obtêm-se,

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{(\kappa - 1)N(t)}{l}. \quad (\text{II.21})$$

Resolvendo-se a equação diferencial acima com κ e l constantes, chega-se a

$$N(t) = N_0 \exp\left[\frac{-(1 - \kappa)}{l} t\right]. \quad (\text{II.22})$$

Observando as curvas que relacionam o número de nêutrons com tempo, Figura II.8, verifica-se que este modelo simples da cinética de um reator nuclear está de acordo com a definição de criticalidade do reator, em termos de κ , ou seja:

- ✚ se $\kappa = 1$, o número de nêutrons no núcleo é sempre o mesmo \rightarrow reator crítico;
- ✚ se $\kappa < 1$, o número de nêutrons decresce de geração para geração, finalizando a reação em cadeia após algum tempo \rightarrow reator subcrítico;
- ✚ se $\kappa > 1$, o número de nêutrons cresce de geração para geração, e a reação em cadeia cresce sem limite \rightarrow reator supercrítico.

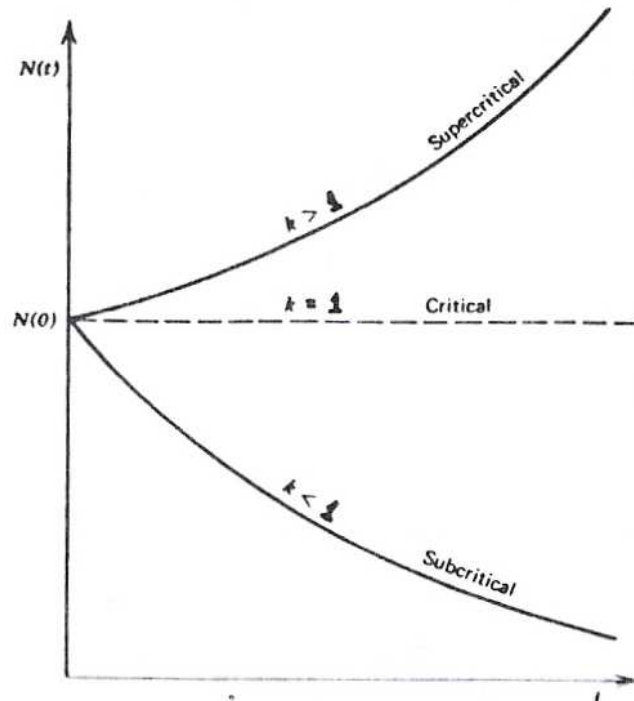


Figura II.8 – Número de nêutrons X tempo [Barros, 2007].

O fator de multiplicação efetivo é de suma importância no momento de projeto do núcleo e durante a operação do reator. Os ajustes feitos nesse fator, para mantê-lo em valores próximos a 1, são possíveis graças à variação no comprimento de barras de controle inseridas no reator, as quais são feitas de núcleos não fissionáveis com seções de choque de captura extremamente grande para nêutrons térmicos. Esses nêutrons retardados facilitam o controle do reator, pois entram na reação de fissão em cadeia somente após uma constante de tempo razoavelmente longa.

I.5 Tipos de sistemas

Podemos ter sistemas homogêneos, quase-homogêneos e heterogêneos, cujas definições são apresentadas abaixo. [Lamarsh, 1966]

II.5.1 Homogêneo

O sistema consiste de uma mistura homogênea de combustível e moderador, sendo este último considerado um meio infinito.

II.5.2 Quase-homogêneo

Na maioria dos reatores, o combustível está disperso numa estrutura sólida, chamada elemento de combustível. O livre caminho médio do nêutron, para todas as energias, é grande comparado à espessura desse elemento, o qual faz parte de arranjos usualmente uniformes.

II.5.3 Heterogêneo

O livre caminho médio para qualquer energia é comparável, ou menor, que a espessura de um elemento combustível. Na maioria dos reatores, o sistema é constituído de uma rede combustível-moderador dividida em células unitárias, contendo uma massa uniforme de combustível em seu centro, conforme ilustram as Figuras II.9 e II.10.

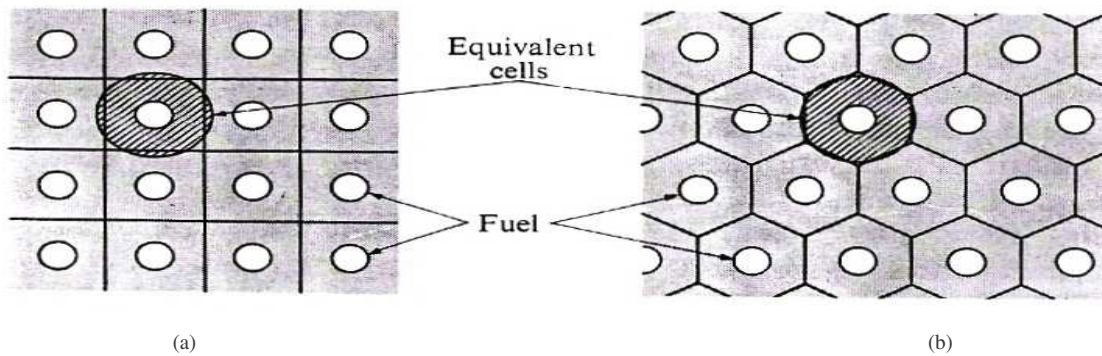


Figura II.9 – Duas redes heterogêneas típicas: quadrada (a) e hexagonal (b) com suas células unitárias [Lamarsh, 1966].

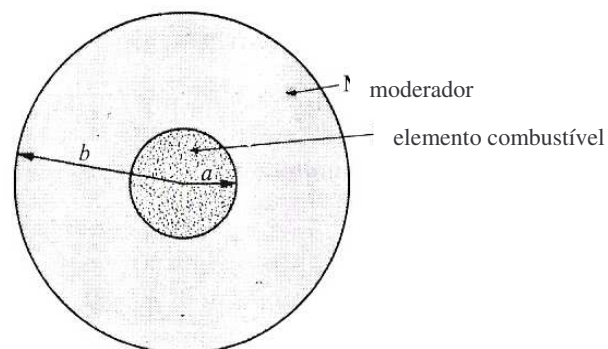


Figura II.10 – Célula cilíndrica equivalente [Lamarsh, 1966].

Apêndice III

Um pouco de história

Em 1896 A. H. Bequerel, após tomar conhecimento da existência dos raios X observados por Röntgen no ano anterior, descobre a radioatividade, obtendo assim a primeira indicação da existência do núcleo atômico. Seus experimentos utilizando o sulfato duplo de urânio e potássio, placas fotográficas e a luz solar tinham a finalidade de investigar a possibilidade de materiais fluorescentes emitirem raios X. Expostos ou não à luz solar, uma imagem do material em estudo aparecia na placa revelada. Tal comportamento levou Bequerel a concluir que o material emitia radiação de maneira espontânea. Por ser considerado errado, o termo radioatividade foi substituído pela expressão fissão espontânea ou natural.

Inúmeros cientistas estudaram a radiação emitida por tais núcleos, mas foi Rutherford, nas primeiras décadas do século XX, quem as classificou como α (núcleos de hélio, ${}^4\text{He}$), β (elétrons) e γ (radiação eletromagnética de comprimento de onda muito pequeno) em função da sua capacidade de penetrar na matéria e ionizar o ar.

A explicação correta da fissão espontânea, como sendo um fenômeno quântico de tunelamento, só foi descrita em 1928 por G. Gamov, R. W. Gurney e E. W. Condon. Em 1932 Chadwick descobre o nêutron; C. D. Anderson, o pósitron e J. D. Cockcroft e E. T. S. Walton observam a primeira reação nuclear usando partículas (prótons) aceleradas artificialmente. Esse ano é considerado o marco inicial da física nuclear moderna.

Hahn e Strassman, em 1939, utilizando técnicas de química, observaram que o bombardeio de urânio por nêutrons, fissão induzida ou artificial, produz elementos do meio da tabela periódica liberando uma enorme quantidade de energia (da ordem de 200 MeV) e que dois ou três nêutrons eram emitidos, podendo induzir outras reações ocasionando um processo de reação em cadeia.

Henrico Fermi e seu grupo de pesquisa, em 1942 na Universidade de Chicago, produziram a primeira reação em cadeia auto-sustentada em um reator nuclear. Esse tipo de reação ocorre quando pelo menos um dos nêutrons produzidos pela fissão do ^{235}U é capturado por outro núcleo de ^{235}U provocando a fissão deste segundo núcleo.

Somente em 2 de dezembro de 1956 foi inaugurado o primeiro reator nuclear para a produção comercial de eletricidade em Shippingport, Pensilvânia (EUA), o qual permaneceu em atividade até outubro de 1982. Foi construído pela Westinghouse para a Duquesne Light Company.



Figura III.1 – *Shippingport Atomic Power Station* em Shippingport, Pensilvânia (EUA).

[US DOE, 2007]

A Figura III.2 mostra o vaso de pressão com 14 toneladas de urânio natural (aproximadamente 99% de ^{238}U) e 75 kg de urânio altamente enriquecido que produzia 90MW de energia elétrica. Atualmente, encontra-se selado com cimento no depósito federal de rejeitos nucleares, em Hanford, Washington.



Figura III.2 – Vaso de pressão do reator de Shippingport, [ESVA, 2007].

Ainda na década de 50, o Almirante Álvaro Alberto seria o pioneiro da tecnologia nuclear no Brasil, criando o Conselho Nacional de Pesquisa, em 1951, e importando duas ultracentrifugadoras da Alemanha para o enriquecimento do urânio, em 1953.

A decisão da implementação de uma usina termonuclear no Brasil só aconteceu de fato em 1969 durante o governo militar, quando foi delegado a Furnas Centrais Elétricas S.A. a incumbência de construir nossa primeira usina nuclear. Um dos motivos da escolha de Angra dos Reis para sede das usinas foi a proximidade com os grandes centros consumidores de energia do País: Rio de Janeiro, São Paulo e Belo Horizonte. Em junho de 1974, as obras de Angra 1 estavam em pleno andamento quando o Governo Federal decidiu ampliar o projeto, autorizando Furnas a construir a segunda usina.

Em 27 de junho de 1975, foi assinado em Bonn, na Alemanha, o Acordo de Cooperação Nuclear, através do qual o Brasil compraria oito usinas nucleares e obteria toda a tecnologia necessária ao seu desenvolvimento nesse setor.

Angra 1 encontra-se em operação desde 1982. Angra 2, após longos períodos de paralização nas obras, inicia sua geração entregando ao sistema elétrico mais que o dobro de

energia de Angra 1. Segundo dados da Eletronuclear, em 2002, Angra 1 e 2 produziram juntas um total de 13,8TWh, o que representava 4,8% da produção nacional.

A Central Nuclear de Angra está pronta para receber sua terceira unidade, Angra 3. Em função do acordo firmado com a Alemanha, grande parte dos equipamentos dessa usina já está comprada e estocada, e a infra-estrutura necessária para montar Angra 3 já existe. Quando entrar em operação, Angra 3 produzirá aproximadamente 10TWh por ano.

Apêndice VI

Os reatores do tipo PWR

Os reatores utilizados nas usinas termonucleares de Angra 1 e 2 são do tipo PWR (*Pressurized Water Reactor*), isto é, utilizam urânio enriquecido moderado como combustível e são refrigerados a água (H_2O) leve pressurizada. Esse sistema pode ser dividido em três circuitos: primário, secundário e de água de refrigeração.

A fissão do combustível nuclear, ^{235}U , ocorre a partir de reações em cadeia no interior do reator, liberando energia térmica para sua vizinhança, aquecendo a água do circuito primário, a qual é mantida a alta pressão para não entrar em ebulição, conforme esquema apresentado na Figura IV.1. Essa água funciona como moderador e como fluido de transferência de energia térmica, passando por um trocador de calor onde aquece a água do circuito secundário transformando-a em vapor. Observa-se, na Figura IV.1, que a água dos circuitos primário e secundário não se mistura, conseqüentemente, os núclídeos radioativos formados no processo de fissão não contaminam a água do circuito secundário.

O vapor formado flui através de uma tubulação movimentando a turbina que acionará o gerador, produzindo eletricidade que será entregue à rede de transmissão. Seguindo pela tubulação, o vapor chega ao condensador, passando para o estado líquido novamente, onde sua temperatura diminui, chegando a aproximadamente $20^{\circ}C$, e então é entregue a um reservatório de água fria (rio, mar ou lago) livre de contaminação por resíduos da fissão nuclear.

Duas características básicas distinguem o PWR quando comparado com outros tipos de reatores:

- ✚ Em um PWR, há dois circuitos refrigerantes separados (primário e secundário), os quais não entram em contato, ambos compostos por água leve, H_2O . Um BWR (*Boiling Water Reactor*) tem apenas um circuito refrigerante,

enquanto outros mais “exóticos” como “*breeder reactors*” usam substâncias diferentes da água (metal líquido, sódio) para a mesma finalidade.

- ✚ A pressão no circuito primário é de aproximadamente 15 MP, notavelmente mais alta que em outros reatores nucleares. Conseqüentemente, a água desse circuito nunca ferverá durante a operação normal do reator. Em um BWR, a água do circuito primário ferverá movimentando diretamente a turbina, sem o uso de um circuito secundário.

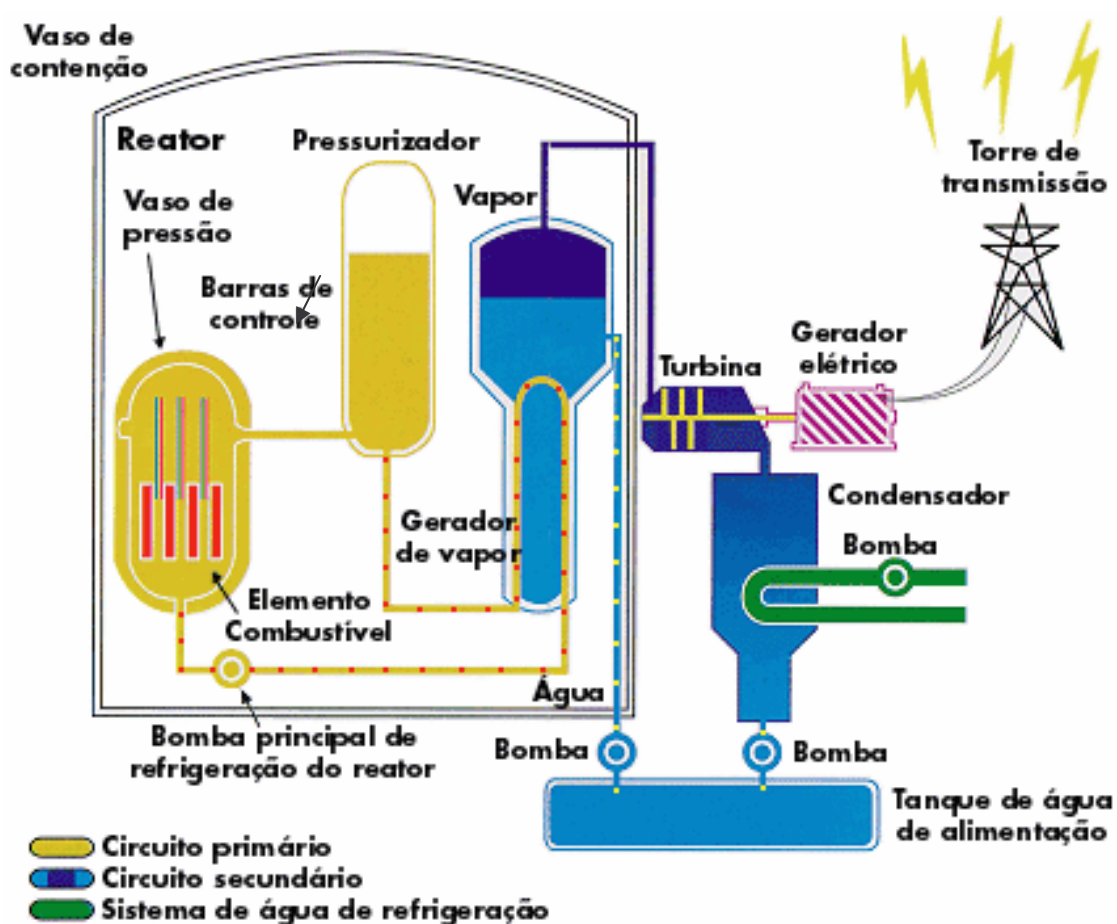


Figura IV.1 – Esquema simplificado do funcionamento de um reator do tipo PWR, [Eletronuclear, 2007].

VI.1 Fluido Refrigerante

A água leve é utilizada como refrigerante principal do PWR e flui através do reator a uma temperatura de aproximadamente 315°C, mantendo-se no estado líquido devido à grande pressão à qual é submetida, por volta de 15 MPa, ou 150 atm. O circuito primário é utilizado

para aquecer a água do circuito secundário, a qual passará ao estado de vapor saturado, a 275°C e 6.2 MPa, que fluirá pela tubulação movimentando a turbina.

VI.2 Moderador

Reatores que utilizam água pressurizada, como os reatores térmicos, necessitam que os nêutrons rápidos, formados a partir das fissões, tenham sua energia diminuída para sustentarem o processo de reação em cadeia. Neste processo, denominado moderação, os nêutrons com alta energia cinética liberados durante as fissões, colidirão com os átomos de hidrogênio da água, diminuindo sua velocidade, e conseqüentemente sua energia. Isso acontecerá mais freqüentemente quanto mais densa for a água. Se a atividade do reator aumentar além do normal, a redução na moderação de nêutrons, ocasionada pela diminuição da densidade da água, fará com que a reação em cadeia torne-se mais lenta, produzindo menos energia térmica. Isso torna os reatores do tipo PWR muito estáveis.

Em contraste, para o RBMK (do acrônimo russo “*reaktor bolshoy moshchnosti kanalny*”, traduzindo-se livremente para o português “reator de alta potência do tipo tubo”), reator utilizado em Chernobyl (usando grafite em vez de água como o moderador), observa-se um aumento na geração de energia térmica quando a temperatura do refrigerante aumenta, tornando-o muito instável. Esta “falha” no *design* do RBMK é vista, geralmente, como uma dentre as várias possíveis causas do acidente de Chernobyl em 1986.

VI.3 Combustível

Normalmente, o urânio usado como combustível no PWR é enriquecido com alta porcentagem de ^{235}U . Depois, o pó de dióxido de urânio (UO_2) é levado a um forno a alta-temperatura para criar varetas de cerâmica compostas de dióxido de urânio enriquecido. As varetas cilíndricas são postas em tubos compostos por uma liga de metal de zircônio resistente à corrosão, chamada Zircaloy, os quais são preenchidos com hélio para ajudar na condução de calor e descobrir vazamentos. Então, são agrupados em arranjos usados para construir o núcleo do reator.

Como medida de segurança, o PWR não contém urânio físsil o suficiente para sustentar uma reação em cadeia apenas com nêutrons prontos, evitando que se produza energia suficiente para danificar, ou até mesmo, derreter o reator. Geralmente, os *bundles* de

combustível, Figura IV.2, consistem em arranjos de 14x14 a 17x17 varetas, de aproximadamente 4m de comprimento, produzindo entre 900 e 1500 MWe.

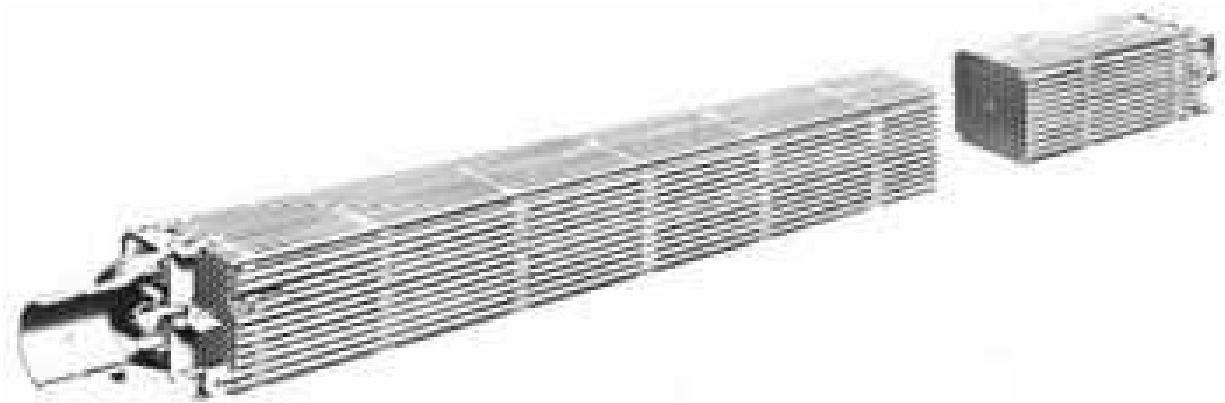


Figura IV.2 – PWR *fuel bundle*, [How Stuff Works, 2007].

IV.4 Sistemas de Controle – Segurança

A potência do PWR pode ser controlada variando-se a concentração de ácido bórico dissolvida na água do circuito primário. O boro absorve nêutrons com facilidade, de maneira que o aumento ou diminuição de sua concentração no reator afetará diretamente a “atividade” dos nêutrons. Um sistema de controle que envolve bombas de alta pressão (normalmente chamado “*charging and letdown system*”) é necessário para remover a água do circuito primário de alta pressão e injetá-la de volta com diferentes concentrações de ácido bórico. As barras de controle inseridas diretamente pelo topo nos *bundles* de combustível são normalmente usadas apenas para iniciar ou finalizar operações.

Os BWRs não têm boro no fluido refrigerante, portanto controlam a potência do reator através de modificações na vazão do refrigerante. Essa é uma vantagem do BWR porque o ácido bórico é muito corrosivo, e o sistema de bombas não se faz necessário. Contudo, em situações de emergência ou para finalizar operações, uma solução contendo ácido bórico altamente concentrado é injetada no circuito refrigerante primário. Reactores que usam CANDU também injetam boro como um dos meios para finalizar a reação em cadeia estabelecida no núcleo do reator.

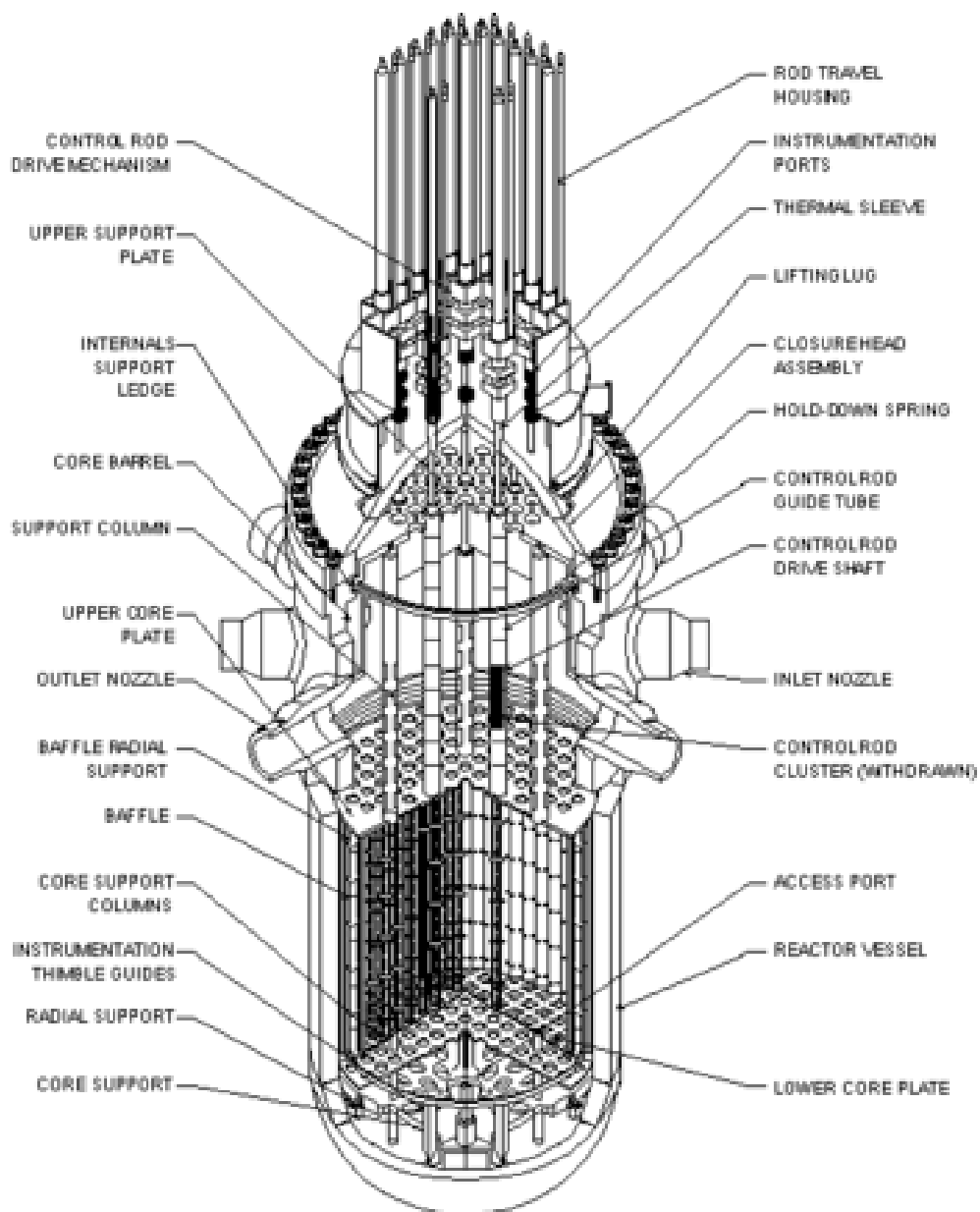


Figura IV.3 – Vaso do reator, [How Stuff Works, 2007].