

PARAMETRIZAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE MACROSCÓPICAS PARA REATORES PWR

João Claudio Batista Fiel

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva Aquilino Senra Martinez

Rio de Janeiro Agosto de 2013

PARAMETRIZAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE MACROSCÓPICAS PARA REATORES PWR

João Claudio Batista Fiel

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

Dr. Luiz Carlos Leal, Ph.D.

Dr. Adimir dos Santos, Ph.D.

Dr. Zelmo Rodrigues, D.Sc.

Prof. Antônio Carlos Marques Alvin, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL AGOSTO DE 2013 Fiel, João Claudio Batista

Parametrização de Seções de Choque Macroscópicas para Reatores PWR/ João Claudio Batista Fiel. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XXI, 204 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 201-204.

Física de Reatores. 2. Parâmetros Nucleares. 3.
 Seção de Choque. I. Silva, Fernando Carvalho da *et al.* II.
 Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
 Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

A meus pais João e Jurema, pelo apoio, carinho, compreensão e incentivo, a mim dedicados, durante toda a minha vida.

"Graças a Deus que nos dá a vitória por intermédio de nosso senhor Jesus Cristo" I Co. 15:57

AGRADECIMENTOS

Agradeço em primeiro lugar a Deus, senhor da minha vida;

Aos meus pais, por tudo que fizeram por mim ao longo da minha vida.

Ao professor e orientador Fernando Carvalho da Silva, pela sua dedicação, pelos seus ensinamentos e experiência, pela sua amizade, por toda a sua orientação acadêmica e por sempre acreditar que esse trabalho fosse possível.

Ao Professor Aquilino Senra Martinez, pela sua orientação e dedicação em transmitir a sua experiência, pelos seus ensinamentos, e pelo seu suporte e apoio ao longo de todo o curso de Doutorado.

Ao amigo Luiz Leal pela dedicação e orientação nos cálculos neutrônicos do código SCALE, e nos procedimentos dos experimentos de Tese de Doutorado na Divisão de Fissão do Oak Ridge National Laboratory.

Ao amigo Cel Mayer e ao Exmo Sr. Gen Ex. Mayer, pela amizade, incentivos, apoio e dedicação em tornar possível a realização desse trabalho.

Aos amigos, Prof Rex Nazaré, Vellozo, Dalton, e Cel Cabral pelo apoio e incentivos ao longo de todo o curso de Doutorado.

À Dona Marcia Mayer, pela amizade e pelo apoio nos momentos mais difícies.

Ao amigo Carlos Eduardo C. Gaio, pelo apoio nas etapas finais desse trabalho.

A todos os amigos e funcionários do Programa de Engenharia Nuclear da COPPE, e do Instituto Militar de Engenharia, em especial ao Gen Div Ratton, Comandante do IME, e ao Cel Carlos, Cmte Corpo de Alunos, pela confiança e incentivos. Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

PARAMETRIZAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE MACROSCÓPICAS PARA REATORES PWR

João Claudio Batista Fiel

Agosto/2013

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva Aquilino Senra Martinez

Programa: Engenharia Nuclear

A proposta deste trabalho é desenvolver, por meio de polinômios de Tchebychev, uma representação parametrizada do comportamento das seções de choque macroscópicas homogeneizadas para um elemento combustível do tipo PWR (Pressurized Water Reactor) em função de parâmetros como a concentração de Boro solúvel, da temperatura do combustível, da temperatura do moderador, da densidade do moderador e do enriquecimento de $^{235}_{92}U$. Dentre as seções de choque analisadas encontram-se a seção de choque de fissão, espalhamento, total, absorção, captura, transporte e nu-fissão.

Essa parametrização capacita, de forma rápida e simples, a determinação de valores de seções de choque de um problema em estudo, possibilitando o uso em cálculos de reatores a poucos grupos (como os reatores do tipo PWR). Os resultados, com base na parametrização, quando comparados com as seções de choque obtidas diretamente pelo código SCALE, possuem diferenças menores do que 1,18 %.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

PARAMETRIZATION OF MACROSCOPIC CROSS SECTION FOR PWR REACTOR

João Claudio Batista Fiel

August/2013

Advisors: Fernando Carvalho da Silva Aquilino Senra Martinez

Department: Nuclear Engineering

The proposal of this work is to develop, by means of Tchebychev polynomial, a parameterized representation of the homogenized macroscopic cross section for PWR (Pressurized Water Reactor) fuel element as a function of soluble boron concentration, moderator temperature, fuel temperature, moderator density and $^{235}_{92}U$ enrichment. Analyzed cross sections are: fission, scattering, total, absorption, transport, nu-fission and capture.

This parameterization enables a quick and easy, determination of the problemdependent cross-sections to be used in few groups calculations. The methodology presented here will enable to perform reactor calculations without the need to generate problem dependent cross sections, which are based on computer code calculations using standard steps. The results, parameterized functions, when compared with cross sections from the SCALE code calculations, show a difference of less than 1.18 percent.

CAPÍTULO 1	1
INTRODUÇÃO	1
1.1 – Definição do Assunto de Tese	1
1.2 – O estado da Arte	3
1.3 – Inserção da Metodologia Proposta	6
1.4 – Descrição dos Capítulos	7
CAPÍTULO 2	9
MÉTODOS DE PARAMETRIZAÇÃO DE	9
SEÇÕES DE CHOQUE MACROSCÓPICAS	9
2.1 – Introdução	9
2.2 – Polinômios de Tchebychev	9
2.2.1 – Definição	
2.2.2 – Propriedades	
2.2.3 – Observações	
2.3 – Parametrização das Seções de Choque	
2.3.1 – Cálculo dos Coeficientes da Expansão em Polinômios de Tch	nebychev
2.3.2 - Expansão em Polinômios de Tchebychev	
2.4 – Parametros de Estado	14
CAPÍTULO 3	16
OBTENÇÃO DAS SEÇÕES DE CHOQUE MACROSCÓPICAS	16
3.1 – Introdução	16
3.2 – Cálculo de Homogeneização	16
3.2.1 Equações Genéricas	
3.2.2 Equações Discretizadas	19
3.3 – Colapsação	20
3.3.1 Equações Discretizadas	20
3.4 – Biblioteca de Dados Nucleares	21
3.5 – Cálculo do Fluxo de Nêutrons	22
CAPÍTULO 4	
DESCRIÇÃO DOS ELEMENTOS COMBUSTÍVEIS TRATADOS	
4.1 – Elemento Combustível sem Veneno Queimável	
4.2 – Elemento Combustível com Veneno Queimável	

ÍNDICE DO TEXTO

4.3 – Cálculo dos dois Elementos Combustíveis Tratados usando o SCALE 30
CAPÍTULO 5
CÁLCULOS PARA O ELEMENTO COMBUSTÍVEL SEM VENENO
QUEIMÁVEL
5.1 – Introdução
5.2 – Parametrização com a Temperatura do Combustível (t _F)32
5.3 – Parametrização com a Temperatura do Moderador (T _M)44
5.4 – Parametrização com a Densidade do Moderador56
5.5 – Parametrização com a concentração de Boro67
5.6 – Parametrização com o Enriquecimento de $^{235}_{92}U$ (E)
5.7 – Parametrização em função da Temperatura e Correspondente Densidade do
Moderador
CAPÍTULO 6
CÁLCULOS PARA O ELEMENTO COMBUSTÍVEL COM VENENO
QUEIMÁVEL99
6.1 – Introdução99
6.2 – Parametrização com a Temperatura do Combustível100
6.3 – Parametrização com a Temperatura do Moderador114
6.4 – Parametrização com a Densidade do Moderador126
6.5 – Parametrização com a Concentração de Boro137
6.6 – Parametrização com o Enriquecimento148
6.7 – Parametrização em função da Temperatura e Correspondente Densidade do
Moderador159
6.8 – Comparação entre os resultados dos cálculos para o elemento combustível
com e sem veneno queimável169
CAPÍTULO 7170
OUTROS RESULTADOS170
7.1 – Introdução
7.2 – Comparação Expansão X Cálculo Direto170
7.3 – Cálculo do Coeficiente de Reatividade de Temperatura174
7.3.1- Comparação com o código SCALE176
7.3.1.1-Resultados das Funções de Seção de Choque Parametrizadas177
7.3.1.2 Resultados Provenientes do código SCALE178

7.3.1.3 Comparação de Resultados	178
7.4– Cálculo do Fator de Fissão Rápida	180
7.5 – Cálculo de k_{∞} (Expansão Polinomial X MCNP)	181
7.6 – Comparação entre o método de parametrização por polinômios de	
Tchebychev e por polinômios de Lagrange	182
CAPÍTULO 8	185
ANÁLISE FINAL E CONCLUSÕES	185
APÊNDICE A	187
PROGRAMAS EM FORTRAN PARA COLAPSAÇÃO DE GRUPO E	
CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE TCHEBYCHEV	187
APÊNDICE B	194
ESPECIFICAÇÃO DA FERRAMENTA DE TRABALHO COMPUTACIO	NAL
	194
APÊNDICE C	195
ESTRUTURA DOS GRUPOS DE ENERGIA	195
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	201

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 4.2 - Elemento Combustível com varetas absorvedoras de Gd2O3 - Vista	a
Superior (SCALE-KENO 3D)	29
Figura 5.1 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	35
Figura 5.3 – Seção de choque total do grupo rápido	36
Figura 5.4 – Seção de choque total do grupo térmico	36
Figura 5.5 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	37
Figura 5.6 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo ráp	oido37
Figura 5.7 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo tér	mico
	38
Figura 5.8 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo té	rmico
	38
Figura 5.9 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	39
Figura 5.10 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	39
Figura 5.11 – Seção de choque de captura do grupo rápido	40
Figura 5.12 – Seção de choque de captura do grupo térmico	40
Figura 5.13 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	41
Figura 5.14 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	41
Figura 5.15 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	42
Figura 5.16 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	42
Figura 5.17 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	47
Figura 5.19 – Seção de choque total do grupo rápido	48
Figura 5.20 – Seção de choque total do grupo térmico	48
Figura 5.21 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	49
Figura 5.22 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rá	ípido
	49
Figura 5.23 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo té	rmico
	50
Figura 5.24 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo	
térmico	50
Figura 5.26 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	51
Figura 5.27 – Seção de choque de captura do grupo rápido	52
Figura 5.28 – Seção de choque de captura do grupo térmico	52
Figura 5.29 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	53

Figura 5.30 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	53
Figura 5.31 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	54
Figura 5.32 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	54
Figura 5.33 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	58
Figura 5.34 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	58
Figura 5.35 – Seção de choque total do grupo rápido	59
Figura 5.36 – Seção de choque total do grupo térmico	59
Figura 5.37 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	60
Figura 5.38 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grup	oo rápido
	60
Figura 5.39 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grup	o térmico
	61
Figura 5.40 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o gru	ıpo
térmico	61
Figura 5.42 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	62
Figura 5.44 – Seção de choque de captura do grupo térmico	63
Figura 5.45 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	64
Figura 5.46 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	64
Figura 5.47 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	65
Figura 5.48 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	65
Figura 5.49 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	69
Figura 5.50 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	69
Figura 5.51 – Seção de choque total do grupo rápido	70
Figura 5.52 – Seção de choque total do grupo térmico	70
Figura 5.53 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	71
Figura 5.54 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grup	o rápido
	71
Figura 5.55 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grup	o térmico
	72
Figura 5.56 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o gru	ıpo
térmico	72
Figura 5.57 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	73
Figura 5.59 – Seção de choque de captura do grupo rápido	74
Figura 5.60 – Seção de choque de captura do grupo térmico	74

Figura 5.61 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	75
Figura 5.62 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	75
Figura 5.63 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	76
Figura 5.64 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	76
Figura 5.65 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	80
Figura 5.66 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	80
Figura 5.67 – Seção de choque total do grupo rápido	81
Figura 5.68 – Seção de choque total do grupo térmico	81
Figura 5.69 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	82
Figura 5.70 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o gru	upo rápido
	82
Figura 5.71 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o gru	upo térmico
	83
Figura 5.72 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o g	rupo
térmico	83
Figura 5.73 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	84
Figura 5.74 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	84
Figura 5.75 – Seção de choque de captura do grupo rápido	85
Figura 5.76 – Seção de choque de captura do grupo térmico	85
Figura 5.77 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	86
Figura 5.78 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	86
Figura 5.79 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	87
Figura 5.80 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	87
Figura 5.81 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	90
Figura 5.82 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	90
Figura 5.83 – Seção de choque total do grupo rápido	91
Figura 5.84 – Seção de choque total do grupo térmico	91
Figura 5.85 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	92
Figura 5.86 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o gru	upo rápido
	92
Figura 5.87 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o gr	upo térmico
	93
Figura 5.88 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o g	rupo
térmico	93

Figura 5.89 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	94
Figura 5.90 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	94
Figura 5.91 – Seção de choque de captura do grupo rápido	95
Figura 5.92 – Seção de choque de captura do grupo térmico	95
Figura 5.93 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	96
Figura 5.94 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	96
Figura 5.95 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	97
Figura 5.96 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	97
Figura 6.1 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	
Figura 6.2 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	104
Figura 6.3 – Seção de choque total do grupo rápido	105
Figura 6.4 – Seção de choque total do grupo térmico	
Figura 6.5 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	
Figura 6.6 – Seção de choque de espalhamento do grupo 1 (rápido) pa	ara o grupo 1
	107
Figura 6.7 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o	grupo térmico
Figure 6.8 - Seção do obeque do espelhemento do grupo tármico poro	
rigura 0.8 – Seção de choque de espaniamento do grupo termico para o	
Figura 6.9 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	
Figura 6.10 – Secão de choque de absorção do grupo térmico	
Figura 6.12 – Secão de choque de captura do grupo térmico	
Figura 6.13 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	
Figura 6.14 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	
Figura 6.15 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	
Figura 6.16 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	
Figura 6.17 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	117
Figura 6.18 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	117
Figura 6.19 – Secão de choque total do grupo rápido	
Figura 6.20 – Seção de choque total do grupo térmico	
Figura 6.21 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	
Figura 6.22 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o	o grupo rápido

Figura 6.23 – Seção de choque de espalhamento do grupo ráp	oido para o grupo térmico
Figura 6.24 – Seção de choque de espalhamento do grupo tér	mico para o grupo
térmico	
Figura 6.25 – Seção de choque de absorção do grupo rápido.	
Figura 6.26 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	
Figura 6.27 – Seção de choque de captura do grupo rápido	
Figura 6.28 – Seção de choque de captura do grupo térmico	
Figura 6.29 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	
Figura 6.30 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	
Figura 6.31 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	
Figura 6.32 – Seção de choque de transporte do grupo térmic	o124
Figura 6.33 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	
Figura 6.34 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	
Figura 6.35 – Seção de choque total do grupo rápido	
Figura 6.36 – Seção de choque total do grupo térmico	
Figura 6.37 – Seção de choque de espalhamento do grupo ráp	oido130
Figura 6.38 – Seção de choque de espalhamento do grupo ráp	oido para o grupo rápido
Figura 6.39 – Seção de choque de espalhamento do grupo ráp	oido para o grupo térmico
Figura 6.40 – Seção de choque de espalhamento do grupo tér	mico para o grupo
térmico	
Figura 6.41 – Seção de choque de absorção do grupo rápido.	
Figura 6.42 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	
Figura 6.43 – Seção de choque de captura do grupo rápido	
Figura 6.44 – Seção de choque de captura do grupo térmico	
Figura 6.45 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	
Figura 6.46 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	134
Figura 6.47 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	
Figura 6.48 – Seção de choque de transporte do grupo térmic	o135
Figura 6.49 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	
Figura 6.50 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	
Figura 6.51 – Seção de choque total do grupo rápido	

Figura 6.52 – Seção de choque total do grupo térmico	
Figura 6.53 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	141
Figura 6.54 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para	o grupo rápido
	141
Figura 6.55 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para	o grupo térmico
	142
Figura 6.56 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico par	ra o grupo
térmico	
Figura 6.57 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	143
Figura 6.58 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	143
Figura 6.59 – Seção de choque de captura do grupo rápido	144
Figura 6.60 – Seção de choque de captura do grupo térmico	144
Figura 6.61 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	145
Figura 6.62 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	145
Figura 6.63 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	146
Figura 6.64 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	146
Figura 6.65 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	
Figura 6.66 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	150
Figura 6.67 – Seção de choque total do grupo rápido	151
Figura 6.68 – Seção de choque total do grupo térmico	151
Figura 6.69 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	152
Figura 6.70 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para	ι o grupo rápido
	152
Figura 6.71 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para	o grupo térmico
Figura 6.72 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico par	ra o grupo
térmico	153
Figura 6.73 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	154
Figura 6.74 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	154
Figura 6.75 – Seção de choque de captura do grupo rápido	
Figura 6.76 – Seção de choque de captura do grupo térmico	155
Figura 6.77 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	156
Figura 6.78 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	156
Figura 6.79 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	

Figura 6.80 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	157
Figura 6.81 – Seção de choque de fissão do grupo rápido	160
Figura 6.82 – Seção de choque de fissão do grupo térmico	160
Figura 6.83 – Seção de choque total do grupo rápido	161
Figura 6.84 – Seção de choque total do grupo térmico	161
Figura 6.85 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido	162
Figura 6.86 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para	o grupo rápido
	162
Figura 6.87 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para	o grupo térmico
	163
Figura 6.88 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para	a o grupo
térmico	163
Figura 6.89 – Seção de choque de absorção do grupo rápido	164
Figura 6.90 – Seção de choque de absorção do grupo térmico	164
Figura 6.91 – Seção de choque de captura do grupo rápido	165
Figura 6.93 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido	166
Figura 6.94 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico	166
Figura 6.95 – Seção de choque de transporte do grupo rápido	167
Figura 6.96 – Seção de choque de transporte do grupo térmico	167

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Parâmetros de análise15
Tabela 2.2 – Valores de Referência
Tabela 3.1 – Comparação do k-inf pelo uso das bibliotecas V7-238, E CE_V7_endf.
Tabela 3.2 – Funções de ponderação padrão para o processamento de dados
multigrupo25
Tabela 4.1 – Comparação do tempo de processamento e k_{inf}
Tabela 5.1 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (t_C)34
Tabela 5.2 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (T_F) 43
Tabela 5.3 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador46
Tabela 5.4 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador (T_M) 55
Tabela 5.5 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (d_M) 57
Tabela 5.6 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (D_M) 66
Tabela 5.7 – Seções de Choque em função da concentração de B^{10} (C_b)68
Tabela 5.8 – Seções de Choque em função da concentração de $B^{10}\left(C_{b}\right)77$
Tabela 5.9 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U(E)$ 79
Tabela 5.10 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U$
Tabela 5.11 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do
moderador
Tabela 5.12 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do
moderador
Tabela 6.1 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (t_C)102
Tabela 6.2 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (T_F) 113
Tabela 6.3 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador (T_M)116
Tabela 6.4 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador (T_M)125
Tabela 6.5 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (d $_M$)127
Tabela 6.6 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (d_M)136
Tabela 6.7 – Seções de Choque em função da concentração de $B^{10}(C_{b}$)138
Tabela 6.8 – Seções de Choque em função da concentração de $B^{10}(C_b)$ 147
Tabela 6.9 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U$ (E)149
Tabela 6.10 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U(E)$ 158

Tabela 6.11 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do
moderador
Tabela 6.12 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do
moderador
Tabela 7.1 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Tchebychev em
Tabela 7.2 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Tchebychev em
Tabela 7.3 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Tchebychev em
Tabela 7.4 – Resultados das Funções de Seção de Choque PWR com UO2-Gd2O3.177
Tabela 7.5 – Resultados de Seções de Choque obtidas pelo SCALE178
Tabela 7.6 – Comparação entre as expansões polinomiais e o SCALE pelo k-inf178
Tabela 7.7 – Comparação entre as expansões polinomiais e o SCALE para $\rho(T)$ 179
Tabela 7.8 – Comparação entre as expansões polinomiais e o SCALE para o $\varepsilon(T)$ 180
Tabela 7.9 – Resultados das Funções de Seção de Choque PWR sem UO ₂ -Gd ₂ O ₃ 181
Tabela 7.10 – Resultados Teste
Tabela 7.11 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Lagrange em
função da temperatura do combustível de 1248 K para um elemento combustível sem
veneno queimável
Tabela 7.12 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Lagrange em
função da temperatura do combustível de 1248 K para um elemento combustível com
veneno queimável

ÍNDICE DE ABREVIATURAS E SIMBOLOS

- G = Número total de grupos de energia;
- \sum_{f} = Seção de choque macroscópica de fissão;
- Σ_t = Seção de choque macroscópica total;
- Σ_c = Seção de Choque macroscópica de captura;
- $v \sum_{f}$ = Número médio de nêutrons emitidos por fissão multiplicado pela seção de choque macroscópica de fissão no grupo g;
- Σ_{tr} = Seção de Choque de captura;
- ϕ_{g} = fluxo de nêutrons do grupo g;

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 – Definição do Assunto de Tese

A análise de um reator nuclear envolve a modelagem neutrônica do núcleo, o controle dos parâmetros termo-hidráulicos e o comportamento mecânico do elemento combustível [1]. Os cálculos neutrônicos são baseados na teoria de transporte e na teoria da difusão, os quais podem ser executados por métodos determinísticos ou probabilísticos (Monte Carlo).

O cálculo neutrônico de um reator nuclear requer seções de choque de poucos grupos de energia, que dependem da composição do material, das células que compõe o elemento combustível e de parâmetros conhecidos como variáveis de estado, os quais incluem a temperatura do combustível, a temperatura do moderador, a densidade do moderador, a concentração de boro e o burn-up (queima) do combustível [2].

Um dos aspectos mais importantes e complexos da análise de um reator nuclear envolve a geração de constantes a poucos grupos rápidos e térmicos adequados, para se determinar as seções de choque de fissão, absorção, espalhamento e remoção e coeficientes de difusão para cada região do núcleo. Uma variedade grande de dados de entrada em programas computacionais é necessária para esses cálculos. Em particular, a temperatura do combustível e a temperatura do moderador, fornecidas pelos módulos termo-hidráulicos são usadas na geração das integrais de ressonancia de alargamento Doppler e dos espectros térmicos. A densidade do moderador para uma determinada região do núcleo é também fornecida por modulos termohidráulicos. A composição do núcleo é fornecida por outros dados de entrada de programas ou por módulos de programas de depleção. Usando-se todas essas informações em conjunto com as bibliotecas de seções de choque microscópicas é que finalmente se consegue determinar os espectros rápidos e térmicos e então calcular as constantes macroscópicas a poucos grupos, usando-se técnicas apropriadas de homogeneização de células. Portanto, como o acesso a valores de dados nucleares de sistemas, como a seção de choque, é considerado de grande relevância nas tarefas da área de Física de Reatores e os métodos empregados para a obtenção de valores de seção de choque, nos cálculos de reatores, geralmente utilizam procedimentos com códigos computacionais nucleares que demandam tempo de processamento e de memória computacional, métodos alternativos têm sido estudados com o propósito de se obter valores de seção de choque de forma rápida e sem a necessidade da dependência computacional.

No entanto, ao invés de se gerar seções de choques a poucos-grupo usando as aproximações tradicionais, toma-se com uma alternativa a parametrização de seções de choque a poucos grupos, em função de constantes conhecidas de um reator. Neste processo, através de uma biblioteca de funções de seções de choque parametrizadas, é possível analisarmos sistemas, pela obtenção de valores de seção de choque que podem ser facilmente empregadas em cálculos neutrônicos da Física de Reatores. Esses valores podem, por exemplo, serem empregados na equação de difusão a poucos grupos de energia, sem a necessidade do uso de códigos computacionais nucleares convencionais.

Por outro lado, as várias análises e estudos feitos atualmente do comportamento da seção de choque macroscópica em função dos parâmetros citados acima, têm apresentado diferentes formas polinomiais de representação, não possuindo uma padronização no formato, ou seja, no grau destas funções de parametrização para um determinado parâmetro analisado. Além disso, os métodos de estudos empregados não citam o estudo preliminar de um tipo de polinômio que melhor aproxime o conjunto de pontos, para uma boa representação do comportamento da seção de choque com os parâmetros nucleares.

Por ser um dado nuclear de grande importância na análise do comportamento neutrônico de um reator, a busca por procedimentos alternativos que forneçam valores de seção de choque, sem a dependência de sistemas complexos de cálculo, e com rapidez e segurança, dinamiza os procedimentos de cálculo, nas tarefas da Física de Reatores.

Este trabalho de tese traz como proposta, o estudo de uma metodologia de cálculo que possibilite a obtenção de valores de seção de choque, de um sistema definido, pelo uso apenas de uma biblioteca de funções parametrizadas.

2

1.2 – O estado da Arte

Os artigos e publicações produzidos nas últimas décadas, a respeito de técnicas de parametrização, retratam o estudo de métodos alternativos aplicados a seções de choque para cálculo de reatores a poucos grupos. Em um retrospecto abrangente dos métodos de parametrização, aplicados a seção de choque, podemos encontrar trabalhos que apresentam a descrição do uso de processos matemáticos desde o método de regressão "*STEPWISE*" [1] até o método de regressão "*QUASI*" [2].

Ao longo dos anos, vários pesquisadores ao redor do mundo introduziram diferentes técnicas para a parametrização da seção de choque a poucos grupos. Visando complementar e atualizar a revisão bibliográica, até o presente momento, será apresentado um pequeno retrospecto, especialmente, dos métodos de parametrização concebidos aplicados à seção de choque.

Em 1999, Leal *et al.* [3] apresentou um esquema denominado Processo Rápido e Automático (ARP) para o cálculo de depleção em aplicação de problemas dependentes de seções de choque a poucos grupos [3]. Neste esquema a aproximação consiste em predeterminar bibliotecas de seção de choque a poucos grupos como uma função de enriquecimentos fixos, burnup, e densidade da água. Essas bibliotecas, juntamente com um esquema de interpolação linear são a essência da metodologia ARP. A aproximação faz parte do sistema de código SCALE para cálculos de depleção e burn-up.

Em 2001, Zimin e Semenov *et al.* [1] propõem um procedimento combinado de interpolação e aproximação para descrever as dependências da seções de choque de nêutrons a poucos grupos em função da queima (burnup) e em função de parametros termo-hidráulicos de uma célula combustível. A seção de choque de neutrôns é apresentada como uma soma de dois termos: a seção de choque base, a qual depende apenas da queima (burnup) e é calculada de acordo com as condições nominais de células, e o desvio, o qual depende de todos os parâmetros da celula combustível inclusive da queima. A dependência da seção de choque em função da queima (burnup) é interpolada por uma função cúbica. As dependências do desvio são aproximadas por uma função polinomial multi-dimensional. A principal característica do procedimento apresentado foi a geração de um polinômio de ótima aproximação, que descreve as dependências do desvio dentro de um determinado grau de tolerância. De acordo com o trabalho, a condição ótima significa que o número de termos que

formam a aproximação polinomial é mínimo para uma dada precisão de aproximação. O problema é resolvido por meio de análise de técnicas de regressão: termos do polinómio de aproximação são selecionados a partir de uma base polinomial inicial utilizando o algoritmo de regressão gradual ("STEPWISE").

O procedimento proposto foi demonstrado pela construção de uma parametrização da seção de choque a dois grupos de energia de uma célula combustível do tipo VVER, em funções da queima (burnup), da densidade do refrigerante, do combustível, da temperatura do refrigerante e da concentração de boro. As seções de choques são calculadas pela probabilidade de colisão em um código chamado UNK. Os Polinômios que descrevem as dependências dos desvios são construídos usando o algoritmo de regressão stepwise.

Em 2008, Bokov *et al.* [2] aborda a técnica de regressão "*QUASI*" para parametrização de seções de choque a poucos grupos de energia. O objetivo de seu trabalho foi criar uma metodologia consistente e flexivel de parametrização, permitindo a criação de uma ferramenta automatizada. A metodologia de regressão "*QUASI*" apresentada inclui as seguintes partes essenciais: aproximação por uma função suave de um número arbitrário de dimensões; incorporação e caracterização da aproximação do erro e a otimização da biblioteca, incluindo o controle de erros pela redução do número de termos de aproximação e do número de parâmetros de estado.

Em 2009, Prinsloo, Bokov, Stander e Botes *et al.* [3], apresenta um método de parametrização automatizada da seção de choque para aplicação em MTR ("Material Test Reactor"). Neste trabalho é descrito a metodologia de parametrização de seção de choque baseada na "*Sparse Grid*" e aplicada a casos de placa MTR, tipo de combustível HEU e combustível LEU, este último contendo venenos queimáveis. O trabalho relata que o advento do mais avançado combustível "MTR" (Material Test Reactor) e projeto de reator necessitam de uma correspondente melhoria no modelo de parametrização da seção de choque aplicada a parâmetros de difusão homogeneizados a poucos grupos de energia. O método tem um certo número de vantagens, tais como: o controlo de erro embutido; o tratamento coerente e avaliação de importância de todos os parâmetros de estado, incluindo burn-up, e a identificação e aproximação de todas as dependências de seção de choque, incluindo os termos cruzados. Ele é aplicado a diferentes modelos de combustível MTR e comparado aos métodos mais tradicionais de parametrização.

Em 2010, Zivanović e Bokov *et al.* [4], apresenta um trabalho sobre parametrização de seção de choque de um reator modular de leito "pebble" usando o modelo de expansão de dimensão larga, e discute o uso de um modelo de expansão nesta dimensão para parametrização de seção de choque. Os componentes do modelo foram aproximados por polinômios ortogonais. O modelo para uma seção de choque específica pode ser construído de forma sistemática a partir de dados diretos, sem qualquer conhecimento a priori de sua estrutura. A metodologia é capaz de construir uma base finita de polinômios ortogonais, que é necessário para parametrizar a seção de choque com uma precisão pré-definida. A metodologia inclui uma análise de sensibilidade global, que indica os parâmetros de estado irrelevantes que podem ser excluídos do modelo sem comprometer a precisão da parametrização e sem a repetição do processo de montagem. Para parametrizar o modelo de expansão de larga dimensão, foram utilizados os métodos de Integração "Randomised Quasi-Monte-Carlo" e "Sparse Grid".

Em 2010, Dufek *et al.* [3], descreve um método que permite a construção de um polinômio de regressão baseado em um modelo nodal de dados nucleares em função de varias variáveis de estado. Usando-se um grande número de variáveis de estado se permite especificar detalhes das condições nodais do presente e do passado e condições ao redor dos nodos, as quais são importantes para simulação futura de um reator.

Este resumido retrospecto dos métodos de parametrização da seção de choque, até o presente momento, visou constatar o fato de que a grande maioria deles é destinada a parametrização da seção de choque de células e de elementos combustíveis a poucos grupos de energia em função de parâmetros, tais como a queima (burnup), a densidade do moderador, temperatura do combustível, temperatura do moderador e da concentração de boro. Em todos os trabalhos observase a descrição de processos que sejam de fácil aplicação e de fácil entendimento, mas que reduzam a introdução de desvios.

1.3 – Inserção da Metodologia Proposta

Como visto nos itens 1.1 e 1.2, vários métodos de parametrização de seção de choque de células e/ou elementos combustíveis a poucos grupos de energia em função de parâmetros foram elaborados e sugeridos ao longo dos últimos anos. Várias técnicas de aproximação, e ajuste de pontos, incluindo o controle de erros, são estudadas e sugeridas.

O presente trabalho descreve, por meio de polinômios de Tchebychev, a análise e o desenvolvimento de uma representação parametrizada (por funções polinomiais) das seções de choque macroscópicas homogeneizadas, de um elemento combustível de um reator do tipo PWR, em função de parâmetros nucleares tais como a concentração de boro solúvel, temperatura do combustível, temperatura do moderador, densidade do moderador e o enriquecimento de $^{235}_{92}U$. Dentre as seções de choque analisadas encontram-se a seção de choque de fissão, espalhamento, total, absorção, transporte, captura e nu-fissão.

A metodologia desenvolvida nesta tese apresenta uma alternativa para se calcular valores de seções de choque macroscópicas homogeneizadas, por meio de uma biblioteca de funções de seção de choque parametrizadas, que possibilite a análise de um reator a poucos grupos, de forma prática, rápida, e sem o dispêndio de tempo de processamento, comum no uso dos códigos computacionais nucleares convencionais.

Como os demais métodos de parametrização de seção de choque macroscópica, este método também utiliza como dados de entrada os resultados oriundos da simulação computacional de um código nuclear. Neste trabalho, é utilizado o SCALE como ferramenta de cálculo para geração das seções de choques a 238 grupos de energia e posterior colapsação em dois grupos de energia: um grupo rápido e outro térmico.

Utiliza-se a parametrização por polinômios de Tchebychev como método de interpolação, devido a algumas vantagens que os polinômios de Tchebychev possuem em relação a outras técnicas possíveis.

1.4 – Descrição dos Capítulos

Em atenção a uma apresentação clara dos objetivos e resultados obtidos através das análises realizadas, este trabalho foi dividido em oito capítulos e apêndices.

Os capítulos são apresentados de forma a abranger os aspectos teóricos envolvidos, a técnica e a ferramenta de análise e apresentar os resultados obtidos. Os apêndices são utilizados para um detalhamento do método empregado, na explicação teórica necessária para o entendimento físico do texto, e na interpretação dos resultados.

O desenvolvimento do caso estudado é detalhado nos capítulos desta tese, de forma a possibilitar uma melhor sequência das idéias.

O **Capítulo 1** apresenta uma visão geral sobre a natureza e dificuldades de se obterem valores de seção de choque e destaca a importância de se possuir esses dados de forma prática. É apresentada uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos publicados sobre métodos de parametrização da seção de choque macroscópica a poucos grupos de energia, evidenciando que a maioria destes trabalhos não cita um estudo preliminar e comparativo de um tipo de polinômio que melhor aproxime o conjunto de pontos estudados, para uma boa representação parametrizada do comportamento da seção de choque. Depois se declara o objetivo da tese o qual é elaborar um conjunto de funções de seções de choque macroscópicas parametrizadas por meio de polinômios de Tchebychev, em função de parâmetros definidos, para o uso em cálculos neutrônicos de um reator do tipo PWR.

O **Capítulo 2** apresenta o método de parametrização que foi utilizado, relaciona os parâmetros de estado estudados e define os valores de referência destes parâmetros. Nesta tese, parametriza-se a seção de choque macroscópica, utilizando como ferramenta de cálculo, para determinação dos coeficientes da expansão polinomial, programas em linguagem FORTRAN contendo sub-rotinas da biblioteca NAG ("*Numerical Algorithms Group*").

O **Capítulo 3** descreve as equações e as sequências de operações utilizadas para se obter as seções de choques colapsadas e apresenta a ferramenta de cálculo utilizada para geração das seções de choque macroscópicas. Neste capítulo, são também apresentados a biblioteca de dados nucleares e o número de grupos de energia utilizados nos cálculos.

O **Capítulo 4** descreve os elementos combustíveis (EC) tratados, apresenta os resultados do k_{inf} de cada EC e apresenta uma comparação no tempo de processamento dos métodos. Neste capítulo é apresentado também os módulos e programas utilizados para a preparação das concentrações isotópicas e dos fluxos.

O **Capítulo 5** apresenta os resultados dos cálculos para o Elemento Combustível sem Veneno Queimável, utilizado como elemento de análise. Neste capítulo são descritos os comportamentos das seções de choque em função dos parâmetros de estado do caso apresentado por gráficos e tabelas de funções.

O **Capítulo 6** descreve os resultados dos cálculos para o Elemento Combustível com Veneno Queimável, utilizado como elemento de análise e compara os resultados deste caso com os obtidos no Capítulo 5. São apresentados também de forma análoga ao Capitulo 5, os comportamentos das seções de choque em função dos parâmetros de estado por gráficos e tabelas de funções.

O **Capítulo 7** descreve os resultados dos testes comparativos realizados, nos quais são comparados os resultados provenientes do uso das funções parametrizadas (expansão polinomial) com os resultados obtidos diretamente pelos códigos SCALE e MCNP. Dentre os testes, é apresentado o teste de sensibilidade, a comparação entre os valores de seção de choque provenientes das funções da expansão polinomial e os obtidos diretamente pelo SCALE, a comparação dos valores de k_{inf} obtido pelas seções de choques provenientes das funções da expansão polinomial e o obtido diretamente pelo código MCNP e a comparação dos coeficientes de reatividade de temperatura e do fator de fissão rápida.

O **Capítulo 8** apresenta as conclusões, recomendações e sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

MÉTODOS DE PARAMETRIZAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE MACROSCÓPICAS

2.1 – Introdução

Neste capítulo são descritos de forma sucinta a teoria dos polinômios de Tchebychev, a parametrização da seção de choque pela expansão polinomial, a descrição dos parâmetros de estado utilizados nesta expansão e a relação dos valores dos parâmetros definidos como valores de referência. Relata-se também que para a determinação dos coeficientes da expansão polinomial, são utilizados programas em linguagem FORTRAN contendo sub-rotinas da biblioteca NAG ("*Numerical Algorithms Group*").

2.2 – Polinômios de Tchebychev

A teoria dos polinômios ortogonais tem relevantes aplicações em diversos problemas da Matemática e Ciências Exatas, os quais satisfazem a várias propriedades, como por exemplo, suas raízes são reais, distintas e estão localizadas dentro de um intervalo. Dentre os polinômios ortogonais que podem ser citados, destacam-se os polinômios de Tchebychev de 1ª ordem, os quais são um caso especial dos Polinômios de Jacobi [6,7]. Esses polinômios são ortogonais em relação à função peso $\omega(x) = (1-x)^{\alpha} (1+x)^{\beta}$, com $\alpha, \beta > -1$ e $\alpha, \beta \in R$, no intervalo [-1,1].

Neste Capítulo, abordamos especificamente os polinômios de Chebyshev de 1^a ordem, denotados, respectivamente, por T_n e algumas de suas propriedades e aplicações [7], utilizadas neste trabalho, como base matemática da expansão polinomial.

2.2.1 – Definição

Em matemática, os Polinômios de Chebyshev ou Polinômios de Tchebychev, receberam esse nome após o Matemático Pafnuty Chebyshev defini-los como uma sequência de polinômios ortogonais, relacionados com a fórmula de Moivre e facilmente obtidos por uma forma recursiva. Costuma-se denotar os polinômios de Tchebychev de primeira ordem por T_n . O uso da letra T para os polinômios de primeira ordem foi dado devido a uma das transliterações de Tchebychev, que admitem também Chebyshev, Tchebyshef e Tschebyscheff [5,6]. Os polinômios de Tchebychev T_n são polinômios de grau n e a sequência dos polinômios de todos os graus formam uma sequência polinômial. Eles são importantes na teoria da aproximação porque as raízes dos polinômios de primeira ordem podem ser utilizadas na interpolação polinomial [5].

Os polinômios de primeira ordem são definidos pela relação recursiva $T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$ (2.1)

A função geradora para T_n é:

$$\sum_{n=0}^{\infty} T_n(x) t^n = \frac{1 - tx}{1 - 2tx + t^2}$$
(2.2)

2.2.2 – Propriedades

Dentre as principais propriedades se destacam:

 A propriedade de aninhamento ou identidade de composição [5,6] é um colorário imediato da definição recursiva dos polinômios de Tchebychev, ou seja:

$$T_n(T_m(x)) = T_{n.m}(x)$$
 (2.3)

Os polinômios de primeira ordem, T_n, formam uma sequência de polinômios ortogonais [5,6,7], e são ortogonais com relação ao peso definido pela equação 2.4, no intervalo [-1,1], ou seja:

$$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}},\tag{2.4}$$

$$\int_{-1}^{1} T_{n}(x) T_{m}(x) \frac{dx}{\sqrt{1-x^{2}}} = \begin{cases} 0 : n \neq m \\ \pi : n = m = 0 \\ \frac{\pi}{2} : n = m \neq 0 \end{cases}$$
(2.5)

Para qualquer n ≥ 1, entre os polinônios de grau n e o coeficiente principal 1, escreve-se a equação 2.6, a qual é uma função onde o valor absoluto máximo no intervalo [−1, 1] é mínimo. O valor máximo nesse caso é 2⁻⁽ⁿ⁻¹⁾.

$$f(x) = \frac{1}{2^{n-1}} T_n(x)$$
(2.6)

- Um polinômio de Tchebychev de grau n tem n raízes simples, chamadas de "nós" de Tchebychev, compreendidas no intervalo [-1,1]. As raízes são muitas vezes chamadas por esse nome porque são frequentemente utilizadas na interpolação polinomial.
- Para os polinômios de Tchebychev de primeira ordem é que todos os máximos e mínimos valores são -1 ou 1no intervalo -1 ≤ x ≤ 1. Dessa forma esse polinômio tem apenas dois valores críticos. Ele também possui os extremos no limite do intervalo de definição das funções, sendo dados por: T_n(1) = 1 e T_n(-1) = (-1)ⁿ.
- Para todo inteiro n não negativo, T_n(x) é um polinômio de grau n. Eles são funções ímpares ou pares de x se n é ímpar ou par, respectivamente.
- Qualquer polinômio arbitrário de grau n pode ser escrito em termos de uma somatória de polinônios de Tchebychev de primeira ordem de grau máximo n.
 Tal polinômio arbitrário p(x) pode ser escrito como:

$$p(x) = \sum_{n=0}^{N} a_n T_n(x).$$
(2.7)

Os primeiros quatros polinônios de Tchebyshev de primeira ordem são:

 $T_0(x) = 1$, $T_1(x) = x$, $T_2(x) = 2x^2 - 1$ e $T_3(x) = 4x^3 - 3x$.

2.2.3 – Observações

Esses polinômios foram escolhidos para compor o método de parametrização das seções macroscópicas deste trabalho, devido às suas propriedades e devido a algumas vantagens que eles apresentam em comparação a outros polinômios, principalmente ao fato de conhecermos suas raízes distintas explicitamente.

Dentre suas principais aplicações, podemos destacar a utilização dos zeros dos polinômios de Tchebychev de 1^a ordem em interpolação polinomial, pois minimiza significativamente o erro nas aproximações. Além disso, a utilização de zeros de polinômios ortogonais clássicos em fórmulas de integração numéricas também minimiza erros de aproximação. Isto conduz a uma melhor precisão, no cálculo dos coeficientes e na estimativa subsequente do ajuste polinomial em pontos específicos.

2.3 - Parametrização das Seções de Choque

O processo de parametrização, neste trabalho, tem por objetivo, determinar funções que melhor se aproximem do conjunto de valores das seções de choques macroscópicas homogeneizadas. Essas seções de choque, após terem sido geradas a 238 grupos de energia e posteriormente colapsadas para dois grupos, são utilizadas como dados de entrada nos programas que determinam os coeficientes de Tchebychev que são apresentados no item 2.3.1.

2.3.1 – Cálculo dos Coeficientes da Expansão em Polinômios de Tchebychev

No processo de busca da descrição da expansão polinomial de Tchebychev, a aproximação dos dados de entrada depende dos valores dos coeficientes, os quais provêm de um ajuste fino numa forma particular, ou seja, para um número de coeficientes da função em questão, o valor dos mesmos é calculado de forma que a distância da função aos dados de entrada (no caso os valores da seção de choque macroscópica) seja o menor possível. Esse ajuste fino, também chamado de coeficiente de correlação, é calculado pela medida da distância entre o conjunto de dados de entrada (seção de choque) e a função f(x).

A distância de um único ponto (x_r, y_r) da função pode simplesmente ser considerada como $\in_r = y_r - f(x)$, e é chamada de residual do ponto.

Neste tipo de descrição o grau do polinômio é dado pelo valor do coeficiente de correlação. Quando o valor do ajuste é mínimo, o polinômio atinge a máxima descrição da curva, ou seja, a máxima aproximação dos pontos, e neste momento o grau do polinômio é definido.

Neste trabalho, após a geração das seções de choque macroscópicas homogeneizadas do EC a 238 grupos de energia sendo as mesmas posteriormente colapsadas para dois grupos, iniciou-se o cálculo dos coeficientes da expansão polinomial.

Para a determinação dos coeficientes de Tchebychev foi elaborado um programa em linguagem FORTRAN, chamado de *Cálculo dos Coeficientes dos Polinômios de Tchebychev*, necessário para se construir as funções polinomiais de Tchebychev. Este programa usa a rotina E01AEF da biblioteca NAG, como uma de suas sub-rotinas para a construção de uma representação de polinômios de Tchebychev de um conjunto de dados.

Após a determinação dos coeficientes, os mesmos foram utilizados na construção da expansão polinomial de Tchebychev para cada tipo de seção de choque considerando o grupo rápido e um grupo térmico.

2.3.2 - Expansão em Polinômios de Tchebychev

A seção de choque é escrita da seguinte forma:

$$f(y) = A_0 T_0(y) + A_1 T_1(y) + A_2 T_2(y) + \dots + A_n T_n(y)$$
(2.8)

onde f(y) representa a seção de choque, A_i é o coeficiente de Tchebychev, e $T_i(y)$ é o polinômio de Tchebychev do primeiro tipo de grau i , para i entre 0 e n. Nesta equação a variável normalizada y representa o argumento, o qual varia num intervalo de -1 a 1 segundo a transformação linear descrita na expressão:

$$y = \frac{2Y - Y_{\min} - Y_{\max}}{Y_{\max} - Y_{\min}}$$
(2.9)

Nesta expressão, Y_{max} e Y_{min} representam o maior e o menor valor de Y no intervalo onde Y é o valor do parâmetro de estado considerado, podendo ser a temperatura do combustível (T_F), temperatura do moderador (T_M), densidade do moderador (d_M), concentração de boro solúvel (C_b) e o enriquecimento de $^{235}_{92}U$ (E) [8,9]. O cálculo desse argumento serve para normalizar qualquer intervalo de valores

da variável Y. Os polinômios $T_i(y)$ assumem, na função f(y) apresentada acima, os valores: $T_0(Y) = 1$; $T_1(Y) = y$, $T_2(Y) = 2y^2 - 1$, $T_3(Y) = 4y^3 - 3y$, $T_4(Y) = 8y^4 - 8y^2 + 1$, etc.

A convenção padrão obedecida pela sub-rotina E01AEF, utilizada como subrotina de cálculo no programa *Cálculo dos Coeficientes dos Polinômios de Tchebychev*, estabelece que o primeiro coeficiente de índice zero, A₀, obtido como dado de saída do programa, deve ser multiplicado pelo valor 0,5, antes de ser utilizado na construção da expansão polinomial de Tchebychev.

O procedimento de cálculo apresentado neste item tem por objetivo, determinar uma representação parametrizada do comportamento da seção de choque em uma função de parâmetros de estado e do enriquecimento de $\frac{235}{92}U$.

2.4 – Parametros de Estado

Na análise de um reator nuclear, os cálculos neutrônicos geralmente requerem seções de choque de poucos grupos de energia, que dependem da composição do material da célula ou do elemento combustível e de parâmetros conhecidos como parâmetros de estado. Estes parâmetros são geralmente definidos como um conjunto de variáveis que descrevem o estado de um sistema dinâmico. Neste trabalho de tese, são considerados como parâmetros de estado a temperatura do combustível, a temperatura do moderador, a densidade do moderador e a concentração de boro. Embora o enriquecimento de $^{235}_{92}U$ não seja considerado como parâmetro de estado, ele foi utilizado como variável na análise do comportamento da seção de choque.

Na análise do comportamento de um dado nuclear como a seção de choque, é recomendável observar como ela se comporta em função de uma determinada variável. Neste contexto, para a escolha dessas variáveis é seguido geralmente um critério de relevância, o qual, de acordo com a sensibilidade da seção de choque, sempre se opta por aquelas que expressam uma maior variação no comportamento da seção de choque.

Dentre as variáveis escolhidas para a análise do comportamento da seção de choque, constam a temperatura do combustível, temperatura do moderador, concentração de Boro, densidade do moderador e o enriquecimento de $\frac{235}{92}U$.

No capitulo 3, é apresentado o desenvolvimento das etapas necessárias para a geração das seções de choque macroscópicas, em função dos parâmetros escolhidos.

A tabela 2.1 apresenta os valores dos parâmeros que foram utilizados na geração das seções de choque estudadas. Esses valores foram escolhidos por eles representarem o intervalo de operação da usina nuclear de Angra II.

Parâmetro	Valor
Enriquecimento de $^{235}_{92}U$	2, 3, 4, e 5 ^w / ₀
Concentração de boro solúvel	250, 500, 750 e 1000 ppm
Temperaturas do combustível	300, 573, 673, 973 e 1473 K
Temperaturas do moderador	300, 400, 573 e 613 K
Densidade do moderador	1,003439; 0,945147; 0,727084 e 0,617629 g/cm ³

Tabela 2.1 – Parâmetros de análise

No método desenvolvido neste trabalho, para a análise do comportamento da seção de choque em função dos parâmetros apresentados acima, foi considerado que as equações foram parametrizadas em função de apenas uma variável, enquanto que as demais variáveis foram mantidas fixas com valores de referência.

Os valores considerados como referência, para cada parâmetro de análise, são os descritos na tabela 2.2. Esses valores foram escolhidos devido aos mesmos serem valores utilizados no cálculo da potência máxima da usina de Angra II.

Variável	Valor de Refêrencia
Enriquecimento de $^{235}_{92}U$	3 ^w / ₀
Concentração de boro solúvel (B ¹⁰)	500 ppm
Temperaturas do combustível	973 K
Temperaturas do moderador	573 K
Densidade do moderador	0,727084 g/cm ³

Tabela 2.2 – Valores de Referência.
CAPÍTULO 3

OBTENÇÃO DAS SEÇÕES DE CHOQUE MACROSCÓPICAS

3.1 – Introdução

Neste capítulo são apresentadas as equações das seções de choque e fluxos de nêutrons, provenientes da homogeneização espacial do elemento combustível que é utilizada nos cálculos do código SCALE. São também descritas as equações das seções de choque colapsadas em dois grupos de energia. São relatadas as bibliotecas de seção de choque de onde provêm todas as seções de choque utilizadas nos cálculos. É apresentado também o código SCALE utilizado como ferramenta de cálculo para a geração das seções de choque.

3.2 – Cálculo de Homogeneização

Para a obtenção das seções de choque homogeneizadas e colapsadas utilizou-se o código NEWT presente no módulo TRITON do sistema SCALE como ferramenta de cálculo [13]. O NEWT processa as seções de choque para a mistura e para uma zona homogeneizada. A ponderação é sempre usada em conjunto com a colapsação da energia. As seções de choque são modeladas sobre o domínio da energia e do espaço. Nos cálculos das seções de choque resultantes do processo são preservadas todas as taxas de reação, isto é,

$$\sigma_G^i = \frac{\int_r N^i(r) dr \int_G \sigma^i(E, r) W(E, r) dE}{\int_r N^i(r) dr \int_G W(E, r) dE}$$
(3.1)

onde

 σ_G^i = seção de choque média ou efetiva em um grupo de energia G para o nuclídeo I, $N^i(r)$ = "number density" de um nuclídeo i na região r, W(E,r) = função de ponderação dentro da região r, $\sigma^{i}(E, r) =$ seção de choque original do input da biblioteca para o nuclideo i na região r.

Dentro do NEWT, cada região colapsada é a região espacial (ou as regiões espaciais), na qual uma data mistura é colocada. Então, para muitos dos tipos de seções de choque, uma seção de choque média para uma mistura associada com o domínio espacial r (a qual pode incluir uma ou mais regiões ocupadas para esta mistura) é calculada pela ponderação dos dados da seção de choque especifica do problema para que a mistura use como uma função de ponderação o fluxo de nêutrons calculado dentro do domínio espacial r.

Na prática, a solução da equação 3.1 é realizada como uma simples soma sobre todas as células j dentro da região r:

$$\sigma_{i,G} = \frac{N_r^i \sum_{j \in r} \sum_{g \in G} \sigma_{g,j}^i W_{g,j}}{N_r^i \sum_{j \in r} \sum_{g \in G} W_{g,j}}$$
(3.2)

Como qualquer região r é definida como a soma de todas as regiões espaciais contendo um dada mistura, N^i é constante para todas as regiões dentro de r.

Todas as seções de choque multigrupo e dados relatados presentes na biblioteca AMPX [22] são ponderadas usando-se as funções de ponderação apropriadas, como descritas na tabela 3.1. Para muitas seções de choque básicas, o fluxo multigrupo obtido da equação de transporte é a função de ponderação apropriada e $W_{g,r}$ na equação 3.2 torna-se $\phi_{g,r}$.

Entretanto, dados e seções de choque especiais precisam de tratamento especial, como é descrito para a seção de choque de espalhamento.

Na ponderação da seção de choque de espalhamento, a forma da ponderação é levemente mais complexa:

$$\sigma_{s,G\to G'}^{i} = \frac{\int_{r} N^{i}(r) dr \int_{G} W(E,r) dE \int_{G'} \sigma^{i}(E \to E',r) dE'}{\int_{r} N^{i}(r) dr \int_{G} W(E,r) dE}$$
(3.3)

ou, em formato multigrupo,

$$\sigma_{s,G\to G'}^{i} = \frac{N_{r}^{i} \sum_{j \in r} \sum_{g \in G} W_{g,r} \sum_{g' \in G'} \sigma^{i}(g \to g')}{N_{r}^{i} \sum_{j \in r} \sum_{g \in G} W_{g,r}}$$
(3.4)

Em geral, o fluxo escalar, $\phi_{g,r}$ é a função de poderação apropriada para a seção de choque de espalhamento:

$$\sigma_G^i = \frac{N_r^i \sum_{j \in r} \sum_{g \in G} \sigma_{g,r}^i \phi_{g,r}}{N_r^i \sum_{j \in r} \sum_{g \in G} \phi_{g,r}}$$
(3.5)

As equações genéricas e discretizadas, representando as seções de choque macroscópicas homogeneizadas são escritas nos itens 3.1.1 e 3.1.2.

3.2.1 Equações Genéricas

Para a seção de choque de espalhamento escreve-se a seguinte equação:

$$\left\langle \sum_{sg'g} \right\rangle_{Cell} = \frac{\int_{V_{Cell}} \int_{E_g}^{E_{g'-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sum_{s} (r, E' \to E) \cdot \phi(r, E') \cdot d^3r \cdot dE'}{\int_{V_{Cell}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \phi_{g'}(r, E') d^3r \cdot dE}$$
(3.6)

onde g = 1,2,3...,G é o índice do grupo de energia e ϕ_g é o fluxo de nêutrons.

Para as demais seções de choque se escreve:

$$\left\langle \Sigma_{xg} \right\rangle_{Cell} = \frac{\int_{V_{Cell}} \int_{E_g}^{E_{g-i}} \Sigma_x(r, E) \cdot \phi(r, E) \cdot d^3r \cdot dE}{\int_{V_{Cell}} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_g(r, E) \cdot d^3r \cdot dE}$$
(3.7)

onde g = 1,2,3...,G é o índice do grupo de energia; \sum_{xg} representa \sum_{f} , \sum_{t} , \sum_{c} , $v \sum_{f}$ e \sum_{tr} e ϕ_{g} é o fluxo de nêutrons.

3.2.2 Equações Discretizadas

Para a seção de choque de espalhamento escrever-se a seção de choque segundo a equação 3.6.

Considerando duas regiões da célula, (combustível e moderador), a seção de choque de espalhamento é escrita da seguinte forma:

$$\left\langle \Sigma_{sg'g} \right\rangle_{Cell} = \frac{V_M \int_{E_g}^{E_{g'-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sum_{s} (E' \to E) \cdot \overline{\phi}_M (E') \cdot dE' + V_M \int_{E_g}^{E_{g'-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sum_{s} (E' \to E) \cdot \overline{\phi}_M (E') \cdot dE'}{V_M \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \overline{\phi}_M (E') \cdot dE + V_F \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \overline{\phi}_F (E') \cdot dE}$$

(3.8)

onde M representa a região do moderador e F representa a região do Combustível.

Os fluxos de nêutrons médios são:

$$\bar{\phi}_{M}(E') = \frac{1}{V_{M}} \int_{V_{M}} \phi(r, E') d^{3}r \ e \ \bar{\phi}_{F}(E') = \frac{1}{V} \int_{V_{F}} \phi(r, E') d^{3}r$$
(3.9)

Para todas as demais seções de choque podemos escrever:

$$\left\langle \Sigma_{xg} \right\rangle_{Cell} = \frac{\int_{V_{Cell}} \int_{E_g}^{E_{g-i}} \Sigma_x(r, E) \cdot \phi(r, E) \cdot d^3 r \cdot dE}{\int_{V_{Cell}} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_g(r, E) d^3 r \cdot dE}$$
(3.10)

onde g = 1,2,3...,G é o índice do grupo de energia; r é a uma região da célula; Σ_{xg} representa Σ_f , Σ_t , Σ_c , $\nu \Sigma_f$ e Σ_{tr} e ϕ_g é o fluxo de nêutrons.

Considerando duas regiões da célula, (Combustível e Moderador) a seção de choque de espalhamento é escrita da seguinte forma:

$$\left\langle \sum_{xg} \right\rangle_{Cell} = \frac{V_M \int_{E_g}^{E_{g^{-1}}} dE \sum^M (E) \overline{\phi}_M (E) + V_F \int_{E_g}^{E_{g^{-1}}} dE \sum^F (E) \overline{\phi}_F (E)}{V_M \int_{E_{g'}}^{E_{g'^{-1}}} \overline{\phi}_M (E) dE + V_F \int_{E_{g'}}^{E_{g'^{-1}}} \overline{\phi}_F (E) dE}$$
(3.11)

onde M representa a região do moderador e F representa a região do Combustível.

Os fluxos de nêutrons médios são:

$$\overline{\phi}_{M}(E) = \frac{1}{V_{M}} \int_{V_{M}} \phi(r, E) d^{3}r \quad e \quad \overline{\phi}_{F}(E) = \frac{1}{V_{F}} \int_{V_{F}} \phi(r, E) d^{3}r \quad (3.12)$$

3.3 – Colapsação

As equações para a colapsação dos 238 grupos de energia em dois grupos são escritas de acordo com a conservação das taxas de reação, dada pelo produto do fluxo de nêutrons pela seção de choque macroscópica para cada tipo de seção de choque, ou seja,

$$\sum_{x,g} (r) \Phi_g \equiv \frac{1}{V} \iint_{E_g}^{E_{g-1}} \sum_x (r, E) \cdot \phi(r, E) \cdot d^3 r \cdot dE$$
(3.13)

onde $\Phi_g = \frac{1}{V} \int_{V} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_g(r, E) d^3 r \cdot dE$ o fluxo total de nêutrons.

A colapsação de 238 grupos para 2 grupos de energia foi feita considerando-se os 199 primeiros grupos de energia como pertencente a faixa rápida e os 39 grupos de energia restantes como pertencentes a faixa térmica de energia.

3.3.1 Equações Discretizadas

Para a seção de choque de espalhamento são escritas as seguintes equações:

i) Espalhamento do grupo 1 para o próprio grupo 1 (Σ_{S11})

$$\Sigma_{s11} = \frac{\sum_{g=1}^{199} \sum_{g'=1}^{199} \sum_{sgg} \Phi_{g'}}{\sum_{g'=1}^{199} \Phi_{g'}}$$
(3.14)

ii) Espalhamento do grupo 1 para o grupo 2 (Σ_{s12})

$$\Sigma_{s12} = \frac{\sum_{g=1}^{199} \sum_{g'=200}^{238} \sum_{sg'g} \Phi_{g'}}{\sum_{g'=1}^{199} \Phi_{g'}}$$
(3.15)

iii) Espalhamento do grupo 2 para o grupo 1 (\sum_{s21})

Neste trabalho, considera-se que não ocorre upscattering. Logo

$$\sum_{s21} = 0.$$
 (3.16)

iv) Espalhamento do grupo 2 para o próprio grupo 2 (\sum_{s22})

$$\Sigma_{s22} = \frac{\sum_{g=200}^{238} \sum_{g'=200}^{238} \sum_{sg'g} \Phi_{g'}}{\sum_{g'=200}^{238} \Phi_{g'}}$$
(3.17)

Para as demais seções de choque são escritas as seguintes equações:

i) Grupo Rápido

$$\sum_{x1} = \frac{\sum_{g=1}^{199} \sum_{xg} \Phi_g}{\sum_{g=1}^{199} \Phi_g}$$
(3.18)

ii) Grupo Térmico

$$\Sigma_{x2} = \frac{\sum_{g=200}^{238} \sum_{xg} \Phi_g}{\sum_{g=200}^{238} \Phi_g}$$
(3.19)

Onde g = 1,2,3...,G é o índice do grupo de energia e \sum_{xg} representa \sum_{f} , \sum_{t} , \sum_{c} , $v \sum_{f} e \sum_{tr} e \Phi_{g}$ é o fluxo de nêutrons.

3.4 – Biblioteca de Dados Nucleares

Neste trabalho, as seções de choque provêm de uma biblioteca fundamental chamada ENDF/B (<u>E</u>valuated <u>N</u>uclear <u>D</u>ata <u>F</u>ile). O sistema SCALE 6.1, usa a biblioteca ENDF/B VII.0 como base.

Num processo de elaboração de biblioteca de seções de choque, vários passos são requeridos antes dos dados medidos serem avaliados em uma forma adequada para o cálculo e projeto de reatores. Dados disponibilizados de muitos centros de avaliação no mundo são submetidos às bibliotecas de dados nucleares as quais testam e preparam os dados para a aplicação na tecnologia nuclear.

As mais importantes bibliotecas de dados nucleares são o arquivo de dados nucleares dos Estados Unidos (ENDF; <u>E</u>valuated <u>N</u>uclear <u>D</u>ata <u>F</u>ile) [14], a biblioteca de dados Nucleares avaliados no Japão (JENDL; <u>J</u>apanese <u>E</u>valuated <u>N</u>uclear <u>D</u>ata <u>L</u>ibrary) [15], os arquivos da União Européia (JEFF <u>J</u>oint <u>E</u>valuated <u>F</u>ission and

<u>F</u>usion)[16], a biblioteca de dados nucleares avaliados na Rússia (BROND <u>R</u>ussian <u>Evaluated N</u>êutron <u>R</u>eaction <u>D</u>ata <u>L</u>ibrary), e a biblioteca de dados nucleares avaliados na China (CENDL <u>C</u>hinese <u>E</u>valuated <u>N</u>uclear <u>D</u>ata <u>L</u>ibrary) [17]. Esses arquivos de dados nucleares são disponibilizados pelo Centro Nacional de Dados Nucleares dos Estados Unidos localizado no Laboratório Nacional de Brookhaven (BNL).

Existem duas bibliotecas associadas com o sistema ENDF[14]: isto é, a biblioteca ENDF/A [14] e a biblioteca ENDF/B[14]. A biblioteca ENDF/A é uma coleção de dados disponibilizados de centros de avaliação diferentes. Nela os dados são armazenados para serem testados. Ela não é ainda uma biblioteca oficial. O grupo de trabalho de avaliação de seção de choque (CSEWG) recomenda o uso de dados selecionados, os quais estão incluídos na biblioteca ENDF/B em um formato adequado ao cálculo e projeto de reatores.

A versão atual da ENDF/B [14] é a ENDF/B-VII [14]. Na biblioteca ENDF/B, que é uma biblioteca oficial por já ter sido testada, a seção de choque pode ser representada pela real especificação dos parâmetros de ressonância (região de ressonância resolvida), ou pela especificação da distribuição estatística de parâmetros (região de ressonâncias não resolvidas), ou as seções de choque podem ser dadas em pontos de energia discretos com uma regra de interpolação especificada. As seções de choque podem ser dadas como uma soma de contribuição dessas representações.

3.5 – Cálculo do Fluxo de Nêutrons

A análise do comportamento da seção de choque leva em consideração a faixa de energia que está sendo analisada, onde o método usado para gerar os vários espectros de energia depende do intervalo de energia dos nêutrons. Para energias acima de 1 Mev (altas energias), é possível aproximar o fluxo de nêutrons ao espectro de fissão, onde o processo dominate é a moderação via espalhamento elástico e inelástico. Para energias intermediárias entre 1eV e 1 MeV, o fluxo varia com 1/E e a ressonância de absorção se torna muito importante. Para energias abaixo de 1 eV podemos aproximar o fluxo pela distribuição de Maxwell-Boltzman, onde o upscattering se torna apreciável com os nêutrons tendendo a se aproximar do equilíbrio térmico com o núcleo do reator na temperatura T [20].

Neste trabalho, para o cálculo dos Fluxos de Nêutros foi utilizado como ferramenta o código nuclear de Monte Carlo, SCALE. O sistema **SCALE** (<u>Standardized Computer Analysis for Licensing Evaluation</u>) é uma ferramenta de projeto e análise de sistemas nucleares, desenvolvida pelo Laboratório Nacional de Oak Ridge (ORNL), formado por um grupo modular de códigos que usam seqüências automáticas fornecendo:

- processamento de problemas dependentes de seções de choque;
- análises de segurança de criticalidade;
- análises e projetos de blindagem de radiação;
- projetos de núcleo de reatores com distribuição isotópica do combustível;
- visualização 3-D avançada e interface automática dos dados de entradas;
- análises de sensibilidades e incertezas;

Ele integra diversos programas da área nuclear, por meio de uma interface simples. Devido aos módulos serem independentes, eles podem ser usados como testes de confiabilidade do método desenvolvido.

Os módulos do SCALE utilizados para o desenvolvimento deste trabalho foram o KENO e TRITON. O KENO é um código de transporte que utiliza o Método de Monte Carlo, empregado para a segurança de criticalidade a fim de realizar analises do fator de multiplicação em projetos de licenciamento de instalações nucleares e em projetos do núcleo de reatores. O TRITON é empregado em cálculo de queima e preparação de seções de choque. Ele possui o código NEWT, o qual é responsável pela homogeneização e colapsação das seções de choque no SCALE.

Como a precisão do cálculo do código nuclear depende da biblioteca, de onde derivam as seções de choques, foi feita uma análise comparativa de resultados, com o uso das bibliotecas v7-238, e ce_V7_endf na análise do elemento combustível. Modelou-se no SCALE a geometria de um elemento combustível, sem veneno queimável, de um reator PWR, as quais são descritas no item 4.1 do quarto capítulo deste trabalho de tese, e fez-se uma análise comparativa do k-inf entre o valor médio calculado pelo uso do KENO Multigrupo, (com a biblioteca de 238 grupos), e pelo cálculo que utiliza o KENO_CE, com o uso da biblioteca de energia contínua [18]. Nesta comparação obtiveram-se os seguintes resultados:

KENO	BIBLIOTECA	k-inf
Multigrupo	V7-238	1.00775 ± 0.00040
CE (Continue Energy)	CE_V7	1.00746 ± 0.00043

Tabela 3.1 – Comparação do k-inf pelo uso das bibliotecas V7-238, E CE_V7_endf.

Para o KENO Mult (V7-238), o valor médio de k-inf foi de 1.00775 ± 0.00040 , enquanto que para o KENO_CE (energia contínua), o valor médio de keff ficou em 1.00746 ± 0.00043 . Por meio desses valores de k-inf, constatou-se a semelhança dos resultados.

Devido à proximidade dos resultados apresentados, e para otimizar o tempo de análise, decidiu-se pelo uso de 238 grupos para a geração das seções de choque. Uma das vantagens dessa escolha está no fato de que o tempo de processamento de um caso pelo KENO_CE é em torno de 3 (três) dias, enquanto que no KENO Multigrupo é em torno de 20 (vinte minutos). A análise utilizando o KENO_CE é equivalente à análise no código MCNP [34].

Após a análise acima descrita optou-se pelo uso da biblioteca 238-group ENDF/B-VII.0 *"libraries"* (V7-238). O sistema de código SCALE inclue a biblioteca de 238 grupos de energia baseada na ENDF/B-VII.0 processado com o sistema de código AMPX [30]. As funções padrão listada na tabela 3.2 são usadas para processar os dados de multigrupos para todos os materiais em 238 grupos, e os fatores de blindagem Bondarenko para essa biblioteca são computados usando-se a aproximação de ressonância estreita (NR) para o espectro do fluxo: $\Phi_{NR}(E) = \sigma_0 / (\sigma_t + \sigma_0)$, onde σ_0 é a seção de choque de fundo. Os fatores de blindagem Bondarenko são tabelados nas temperaturas de 293K, 900K e 1200K na biblioteca de 238 grupos. A biblioteca de seção de choque de 238 grupos é referenciada como a biblioteca mestre do SCALE.

Tabela 3.2 – Funções de ponderação padrão para o processamento de dados multigrupo

Intervalo de energia	Função Peso Padrão
$10^{-5} \mathrm{eV} - 0.1 \mathrm{eV}$	Maxwelliana com pico em 0.0025 eV
0.1 eV. – 80 keV	1/E
80 k eV – 10 MeV	Espectro de Fissão de Watt na temperatura de 1.273 MeV
10 MeV – 20 MeV	1/E

A seção de choque é obtida pela média dos pontos de seção de choque usando as funções de ponderação como indicado na tabela 3.2.

No anexo C é apresentado a estrutura dos grupos de energia utilizados neste trabalho.

CAPÍTULO 4

DESCRIÇÃO DOS ELEMENTOS COMBUSTÍVEIS TRATADOS

4.1 – Elemento Combustível sem Veneno Queimável

Neste capítulo são descritas as geometrias, composições e dimensões utilizadas na modelagem computacional dos elementos combustíveis (EC) tratados no código SCALE, utilizando como referencia às especificações de um EC típico de um reator PWR [19,23]. A composição isotópica e a configuração geométrica da configuração do elemento combustível estudado foram definidos pelas informações obtidas do FSAR (Relatório Final de Análise de Segurança) de ANGRA 2.

Após o estudo descrito no capítulo anterior para a escolha da biblioteca "238group ENDF/B-VII.0" (V7-238), iniciou-se a modelagem geométrica de um elemento combustível sem varetas absorvedoras, utilizando a aplicação de transporte a 2D (duas dimensões) do NEWT presente no módulo TRITON [21]. Neste módulo, as concentrações isotópicas ("Number Densities") são preparadas e os fluxos de nêutrons calculados. Nele, também são processadas as seções de choque para a mistura e para uma zona homogeneizada. Para esta análise, a composição isotópica definida é formada por três misturas pertencentes a duas regiões de célula distintas.

Na composição básica padrão as misturas foram definidas como:

- Mistura 01 : Combustível UO₂ $\binom{235}{92}U$ e $\frac{238}{92}U$);
- Mistura 02 : Solução borada (H₂O +B¹⁰);
- Mistura 03 : Estrutura Zircaloy,

A primeira região consta de células quadráticas formadas por cubóides de água borada contendo no seu interiror, cilindros concêntricos estruturados por zircaloy-4, possuindo U₂O enriquecido com $^{235}_{92}U$. Esta configuração representa as varetas combustíveis.

A segunda região consta de células quadráticas formadas por cubóides de água borada contendo no seu interior, cilindros concêntricos estruturados por zircaloy-4, possuindo $H_2O + B^{10}$. Esta configuração representa o tubo guia.

Conforme citado no capítulo 3, esta análise foi feita utilizando-se 238 grupos de energia sendo os mesmos colapsados para dois grupos de energia, um grupo rápido e outro térmico. O grupo rápido foi definido pelos 199 primeiros grupos e o grupo térmico foi definido pelos 39 grupos restantes. A energia de corte ficou em 0,625E+00 eV. A estrutura dos grupos de energia é descrita no anexo C, deste manuscrito de tese.

A figura 4.1 mostra a geometria quadrada do elemento combustível modelado no SCALE, onde os cuboides verdes com cilindros roxos representam as varetas combustíveis padrão e os cuboides verdes com cilindros verdes simbolizam os tubos guias.



Figura 4.1 – Elemento Combustível – Vista Superior (SCALE-KENO 3D)

A descrição do elemento combustível consta de:

- Tipo: 16X16;
- Número de varetas combustível por elemento combustível: 236;
- "Pitch" vareta combustível: 14,3 mm;
- Massa de combustível (UO₂) por assembly (EC): 616 Kg;

Para a vareta combustível descreve-se:

- Raio do Pellet (médio): 4,555 mm;
- Raio interno do "clad": 4,650 mm;
- Raio externo do "clad": 5,375 mm;
- Material do "Clad" = Zircaloy;
- Massa de Zircaloy dos 236 varetas combustível em comprimento ativo: 138,7 Kg.

• Comprimento da vareta combustível (comprimento ativo): 390 cm;

Para o tubo guia descreve-se:

- Raio interno: 6,2 mm;
- Raio externo: 6,9 mm;
- Massa de Zircaloy dos 20 tubos Guia em comprimento ativo: 14,8 Kg.

4.2 – Elemento Combustível com Veneno Queimável

Analogamente ao item 4.2, a modelagem geométrica de um elemento combustível com varetas absorvedoras de Gd_2O_3 foi realizada seguindo os procedimentos conforme descritos neste item.

A composição isotópica e a configuração geométrica da configuração do elemento combustível com veneno queimável estudado, foram definidos pelas informações obtidas do FSAR (Relatório Final de Análise de Segurança) de ANGRA 2, onde se escolheu a configuração com 12 varetas absorvedoras para se obter uma diferenciação maior de resultados em relação ao elemento combustível descrito no item 4.1.

Para esta nova análise, a composição isotópica apresentada é formada por quatro misturas pertencentes a três regiões de célula distintas.

Na composição básica padrão as misturas foram definidas como:

- Mistura 01 : Combustível UO₂ ($^{235}_{92}U$ e $^{238}_{92}U$);
- Mistura 02 : Solução borada $(H_2O + B^{10})$;
- Mistura 03 : Estrutura Zircaloy;
- Mistura 04 : Combustível com Material Absorvedor UO₂+Gd₂O₃,

A primeira região consta de células quadráticas formadas por cubóides de água borada contendo no seu interiror, cilindros concêntricos estruturados por zircaloy-4, possuindo U₂O enriquecido com $^{235}_{92}U$. Esta configuração representa as varetas combustíveis.

A segunda região consta de células quadráticas formadas por cubóides de água borada contendo no seu interior, cilindros concêntricos estruturados por zircaloy-4, possuindo uma solução borada ($H_2O + B^{10}$). Esta configuração representa o tubo guia.

A terceira região consta de células quadráticas formadas por cubóides de água borada contendo no seu interiror, cilindros concêntricos estruturados por zircaloy-4, possuindo uma mistura de $U_2O + Gd_2O_3$. Esta configuração representa as varetas absorvedoras.

A figura 4.2 mostra a distribuição geométrica, simulada no SCALE, do elemento combustível com varetas absorvedora de Gd_2O_3 , onde os cuboides verdes com cilindros roxos representam as varetas combustíveis padrão, os cuboides verdes com cilindros verdes simbolizam os tubos guias e os cuboides verdes com cilindros amarelos simbolizam as varetas combustíveis com material absorvedor de Gd_2O_3 .



Figura 4.2 – Elemento Combustível com varetas absorvedoras de Gd2O3 – Vista Superior (SCALE-KENO 3D)

A descrição geométrica deste elemento combustível é análoga à descrita no item 4.2, sendo apenas complementada com 12 varetas absorvedoras (U/Gd), com a composição de U235/Gd₂O₃ w/o : 0.71 / 7.0. [23]

4.3 – Cálculo dos dois Elementos Combustíveis Tratados usando o SCALE.

Para que se comparasse o tempo de processamento do SCALE e o fator de multiplicação infinito para os elementos combustíveis tratados, foi considerado que os mesmos possuíam uma configuração padrão, em que ambos tinham parâmentros com valores de referência, definidos na tabela 2.2 do segundo capítulo. Os resultados são apresentados na tabela 4.1.

Elemento Combustível	Tempo de Processamento (min)	$k_{ m inf}$
Sem Veneno Queimável	16,69 minutos	1.25808215
Com veneno Queimável	24,26 minutos	0.92564064

Tabela 4.1 – Comparação do tempo de processamento e k_{inf}

Pelos resultados apresentados na tabela 4.1, observa-se que o tempo de processamento para o elemento combustível (EC) com veneno queimável é bem maior do que o tempo de processamento para o elemento combustível sem veneno queimável. Pode-se entender esse aumento do tempo para o EC com veneno queimável, devido ao fato do mesmo possuir um maior número de regiões e nuclídeos para se processar os cálculos de homogeneização e colapsação e, se obter as seções de choque macroscópicas homogeneizadas e os fluxos médios das células.

Em relação ao k_{inf} , observa-se que a comparação dos resultados mostra que o valor para o elemento combustível com veneno queimável é menor do que para o EC sem veneno queimável, devido ao aumento da absorção de nêutrons e por consequência, diminuição do número de fissões pela presença do material absorvedor (Gd₂O₃).

Após o processamento da modelagem do elemento combustível pelo código, os dados nucleares (seções de choques macroscópicas de células homogeneizadas) e fluxos de nêutrons médios nas células, calculados são gravados em arquivos para o uso nos cálculos dos coeficientes da expansão polinomial.

CAPÍTULO 5

CÁLCULOS PARA O ELEMENTO COMBUSTÍVEL SEM VENENO QUEIMÁVEL

5.1 – Introdução

Com os valores das seções de choques macroscópicas obtidas no capitulo 4, foi possível, por meio de um programa em linguagem FORTRAN chamado de *Cálculo dos Coeficientes dos Polinômios de Tchebychev*, obter os coeficientes de Tchebychev necessários para escrever as expansões polinomiais em função de cada parâmetro nalisado. Neste capítulo, são apresentadas em tabelas as expansões polinomiais das seções de choque macroscópicas hogeneizadas parametrizadas em função da temperatura do combustível, temperatura do moderador, densidade do moderador, concentração de ${}^{10}_{5}B$, e do enriquecimento ${}^{235}_{92}U$. Gráficos são usados para representar o comportamento das seções de choque em função dos parâmetros descritos.

As expansões polinomiais apresentadas nas tabelas deste capítulo foram escritas com os coeficientes contendo valores com até seis casas decimais, ou seja, valores maiores que 10⁻⁶. Valores de coeficientes menores que 10⁻⁶ foram desprezados.

Neste capítulo, também é apresentada uma descrição gráfica para cada seção de choque descrita em função dos parâmetros analisados de forma individualizada para cada expansão polinomial, por meio das figuras 5.1 a figura 5.96, apresentadas em cada item.

Nas equações parametrizadas apresentadas nas tabelas, y significa o argumento o qual provém de uma transformação linear segundo a equação:

$$y = \frac{2Y - Y_{\min} - Y_{\max}}{Y_{\max} - Y_{\min}}$$
(5.1)

onde Y significa o valor real do parâmetro de estado podendo ser a temperatura do moderador, temperatura do combustível, densidade do moderador, concentração de boro e o enriquecimento de $^{235}_{92}U$. Y_{max} e Y_{min} são os valores máximo e mínimo de cada intervalo dos parâmetros.

É apresentada também, para cada parâmetro analisado, uma segunda tabela de funções parametrizadas de seções de choque, na qual se descreve as expansões de Tchebychev em função dos próprios parâmetros.

5.2 – Parametrização com a Temperatura do Combustível (t_F)

Quando a temperatura do combustível se eleva os materiais que o compõe são expandidos com o calor, fazendo com que sua densidade diminua. Isto resulta no aumento do comprimento de difusão e no tempo de vida dos nêutrons térmicos. Ocorre também um aumento da probabilidade de fuga de nêutrons durante a moderação para energias térmicas e a captura de nêutrons térmicos.

As funções parametrizadas de seção de choque, em função da temperatura do combustível, são descritas na tabela 5.1, onde o argumento y provém de uma transformação linear representada na equação 5.1, sendo seus valores variando de -1 a 1. Nesta expressão, Y é igual a $\sqrt{t_F}$, sendo t_F a temperatura do combustível em Kelvis. Os valores de t_{F max} e t_{F min} para esta análise são respectivamente 1473 K e 573 K. Estas funções apresentaram um comportamento dentro do esperado, de acordo com o que é descrito na teoria da física de reatores.

Pela análise do comportamento das seções de choque macroscópicas representado pelas expansões polinomiais, descritas na tabela 5.1, pode-se observar que: Há uma diminuição da taxa de fissão e também ocorre um aumento da taxa de absorção com o aumento da temperatura do combustível. Em relação à seção de choque de fissão, observou-se uma maior resposta para o grupo térmico do que para o grupo rápido, conforme mostram as figuras 5.1 e 5.2 e as funções 5.1 e 5.2 descritas abaixo.

$$\sum_{f}^{R}(y) = 0,002284 \tag{5.2}$$

$$\sum_{f}^{T} = 0.042208 - 0.000200 y 002284 \tag{5.3}$$

Os comportamentos das expansões de seção de choque de fissão, absorção e captura, do grupo rápido e do grupo térmico, estão de acordo com o esperado, já que o aumento da temperatura do combustível conduz a um aumento da captura ressonante do $^{238}_{92}U$ devido ao efeito Doppler da ressonância. Ocorre também um decréscimo na alto-blindagem, e por consequência um alargamento da ressonância de

absorção. Podemos observar esse aumento da taxa de absorção conforme mostra a função 5.3 e a figura 5.7.

$$\sum_{a}^{R} (y) = 0,526833 + 0,000350y$$
(5.4)

O aumento da energia cinética do núcleo do $^{238}_{92}U$ aumenta a largura da ressonância, mas decresce a altura do pico de ressonância mantendo constante a área total sobre a curva de ressonância. Se a ressonância das seções de choque de absorção é grande o suficiente, de forma que todos os nêutrons com energias na região da ressonância sejam capturados, o alargamento da região resultará no decréscimo da probabilidade de escape da ressonância, na elevação da temperatura. É importante citar que nem todos os nêutrons absorvidos por um material físsil provocam a fissão, pois algumas absorções resultam na emissão de raios-gama, havendo uma competição entre a ocorrência de fissão e a ocorrência de captura radiativa.

Observa-se que as funções da seção de choque de captura, atendem a esse comportamento, ou seja, há um aumento da taxa de ocorrência da captura radioativa para o grupo rápido, conforme explicado acima, como descrevem a figura 5.9 e a função 5.4 da seção de choque da captura radioativa descrita abaixo.

$$\sum_{c}^{R}(y) = 0,006725 + 0,000250y \tag{5.5}$$

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 5.5 e 5.6.

$$\nu \sum_{f}^{R} (y) = 0,005698 \tag{5.6}$$

$$v \sum_{f}^{T} (y) = 0,102851 - 0,000467y + 0,000100y^{2}$$
(5.7)

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002284
	Térmico	0,042208 – 0,000200y
Total	Rápido	0,526833 + 0,000350y
	Térmico	$1,237235 - 0,000616y - 0,000100y^3$
Espalhamento	Rápido	0,517950 + 0,000050y
Total	Térmico	$1,170474 - 0,000300y - 0,000167y^2 + 0,000133y^3$
Absorção	Rápido	0,008934 + 0,000250y
	Térmico	0,066689 – 0,000250y
Captura	Rápido	0,006725 + 0,000250y
	Térmico	0,024481 - 0,000050y
Nu-Fissão	Rápido	0,005698
	Térmico	$0,102851 - 0,000467y + 0,000100y^2$
Transporte	Rápido	$0,214008 + 0,000216y + 0,000049y^2 - 0,000333y^3$
	Térmico	0,748014 – 0,000450y
Espalhamento 1-1		0,498700 + 0,000300y
Espalhamento 1-2		0,019250 – 0,000200y
Espalhamento 2-2		$1,170474 - 0,000300y - 0,000166y^2 + 0,000133y^3$

Tabela 5.1 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (t_C)

As figuras abaixo apresentam as funções parametrizadas, de forma individualizada, para que se proporcione uma visão mais clara do comportamento das seções de choque em função da temperatura do combustível. Nestas figuras, são apresentadas as expansões polinomiais onde os valores dos coeficientes são escritos sem limite de casas decimais.



Figura 5.1 - Seção de choque de fissão do grupo rápido







Figura 5.5 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido



Figura 5.6 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 5.7 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 5.8 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico



Figura 5.9 – Seção de choque de absorção do grupo rápido



Figura 5.10 - Seção de choque de absorção do grupo térmico



Figura 5.11 - Seção de choque de captura do grupo rápido



Figura 5.12 – Seção de choque de captura do grupo térmico



Figura 5.13 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido



Figura 5.14 - Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico



Figura 5.15 – Seção de choque de transporte do grupo rápido



Figura 5.16 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da temperatura do combustível, foram reescritas na tabela 5.2, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y, onde $T_F = \sqrt{t_F}$, sendo t_F a temperatura do combustível..

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$2,284x10^{-3}$
	Térmico	$4,266x10^{-2} - 4,44x10^{-7}T_F$
Total	Rápido	$5,260x10^{-1} + 7,770x10^{-7}T_F$
	Térmico	$1,240 - 4,809x10^{-6}T_F + 3,361x10^{-9}T_F^2 - 1,094x10^{-12}T_F^3$
Espalhamento	Rápido	$5,178x10^{-1} + 1,110x10^{-7}T_F$
Total	Térmico	$1,169 + 5,597x10^{-6}T_F - 5,293x10^{-9}T_F^2 + 1,455x10^{-12}T_F^3$
Absorção	Rápido	$8,366 \times 10^{-3} + 5,550 \times 10^{-7} T_F$
	Térmico	$6,726x10^{-2} - 5,550x10^{-7}T_F$
Captura	Rápido	$6,157x10^{-3} + 5,550x10^{-7}T_F$
Cupturu	Térmico	$2,459x10^{-2} - 1,110x10^{-7}T_F$
Nu-Fissão	Rápido	5,698x10 ⁻³
	Térmico	$1,044x10^{-1} - 2,046x10^{-6}T_F + 4,928x10^{-10}T_F^{-2}$
Transporte	Rápido	$2,177x10^{-1} - 1,148x10^{-5}T_F + 1,143x10^{-8}T_F^2 - 3,643x10^{-12}T_F^3$
	Térmico	$7,490x10^{-1} - 9,990x10^{-7}T_F$
Espalhamento 1-1		$4,980x10^{-1} + 6,660x10^{-7}T_F$
Espalhamento 1-2		$1,970x10^{-2} - 4,440x10^{-7}T_F$
Espalhamento 2-2		$1,169 + 5,587x10^{-6}T_F - 5,288x10^{-9}T_F^2 + 1,455x10^{-12}T_F^3$

Tabela 5.2 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (T_F)

5.3 – Parametrização com a Temperatura do Moderador (T_M)

As funções parametrizadas de seção de choque, em função da temperatura do moderador, são descritas na tabela 5.3, onde o argumento y provém de uma transformação linear representada na equação 5.1, sendo t_M a temperatura do moderador em Kelvis. Os valores de t_{Mmax} e t_{Mmin} para esta análise são respectivamente 300 K e 613 K.

Pela análise do comportamento das seções de choque macroscópicas representado pelas expansões polinomiais, descritas na tabela 5.3, pode-se observar que a seção de choque de fissão tem um comportamento similar ao descrito no item anterior, sendo para o grupo rápido, muito pouco sensível com a variação da temperatura do moderador, mantendo-se praticamente com valores constantes, mas diminuindo para o grupo térmico, conforme as figuras 5.17 e 5.18 e as funções 5.7 e 5.8 descritas abaixo.

$$\sum_{f}^{R}(y) = 0,002283 \tag{5.7}$$

$$\sum_{f}^{T} (y) = 0.041712 - 0.001728y + 0.002833y^{2} - 0.001600y^{3}$$
(5.8)

O aumento da temperatura do moderador conduz a uma diminuição da moderação de nêutrons e por consequência, uma diminuição no número de fissões.

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas figuras 5.28 e 5.29 e nas expansões 5.9 e 5.10 descritas abaixo.

$$\nu \sum_{f}^{R} (y) = 0,005697 \tag{5.9}$$

$$v \sum_{f}^{T} (y) = 0,102300 - 0,004022y + 0,007022y^{2} - 0,004133y^{3}$$
(5.10)

Observa-se que a seção de choque de absorção na faixa rápida foi pouco sensível ao aumento da temperatura, não havendo variação significativa na taxa de absorção de nêutrons, conforme se descreve a função 5.11 abaixo.

$$\sum_{a}^{R}(y) = 0,0089084 \tag{5.11}$$

Na faixa térmica, a seção de choque de absorção se comporta, conforme a função 5.12.

$$\Sigma_a^T = 0,066396 - 0,002528y + 0,004400y^2 - 0,002733y^3$$
(5.12)

Observa-se também que o aumento da temperatura do moderador, conduz a um endurecimento do espectro, resultando também em um alargamento da ressonância de absorção, em ressonancias "low-lying" para os isótopos ${}^{238}_{92}U$. Tais efeitos conduzem a um coeficiente de reatividade mais negativo. Neste caso aumenta-se a absorção de nêutrons pelo ${}^{238}_{92}U$ devido ao nêutron se tornar mais transparente, ou seja, como a moderação diminue um maior número de nêutrons de uma vareta combustível atinge a outra com energias maiores.

As funções da seção de choque de captura neste caso, para ambos os grupos, acampanhou o mesmo comportamento da seção de choque de absorção, conforme podemos constatar nas funções 5.13 e 5.14.

$$\sum_{c}^{R}(y) = 0,006725 \tag{5.13}$$

$$\sum_{c}^{T}(y) = 0.024333 - 0.000767y + 0.001667y^{2} - 0.001400y^{3}$$
 (5.14)

Observamos também que os valores da seção de choque de absorção, oriundos de sua respectiva expansão polinomial, são iguais à soma dos valores das seções de choque de fissão e captura, obtidas pelos mesmos processo. De forma análoga, se constata que os valores de seções de choque total, oriundos da expansão polinomial é a soma dos valores das seções de choque de espalhamento e absorção, obtidos analogamente.

Observa-se que as seções de choque de espalhamento aumentam com a elevação da temperatura do moderador conforme as funções 5.15 e 5.16.

$$\sum_{s}^{R}(y) = 0,517925 + 0,000050y \tag{5.15}$$

$$\sum_{s}^{T}(y) = 1,182258 - 0,007476y + 0,006424y^{2} - 0,029370y^{3}$$
(5.16)

Isto ocorre devido ao moderador já possuir uma alta seção de choque de espalhamento e uma baixa seção de choque de absorção.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002283
	Térmico	$0,041712 - 0,001728y + 0,002833y^2 - 0,001600y^3$
Total	Rápido	0,526783 + 0,000050y
	Térmico	$1,235810 - 0,009665y + 0,034174y^2 - 0,030978y^3$
Espalhamento	Rápido	0,517925 + 0,000050y
	Térmico	$1,182258 - 0,007476y + 0,006424y^2 - 0,029370y^3$
Absorção	Rápido	0,008908
	Térmico	$0,066396 - 0,002528y + 0,004400y^2 - 0,002733y^3$
Captura	Rápido	0,006725
	Térmico	$0,024333 - 0,000767y + 0,001667y^2 - 0,001400y^3$
Nu-Fissão	Rápido	0,005697
	Térmico	$0,102300 - 0,004022y + 0,007022y^2 - 0,004133y^3$
Transporte	Rápido	0,214028
	Térmico	$0,747524 - 0,006243y + 0,010774y^2 - 0,006711y^3$
Espalhamento 1-1		0,498650 + 0,000050y
Espalhamento 1-2		0,019250
Espalhamento 2-2		$1,182258 - 0,007476y + 0,006424y^2 - 0,029370y^3$

Tabela 5.3 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador



Figura 5.17 – Seção de choque de fissão do grupo rápido







0,49858 0,49856 550 250 300 . 350 400 . 450 500 600 650 Temperatura do Moderador (K) Figura 5.22 - Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo

0,49860

rápido



Figura 5.23 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 5.24 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico








Figura 5.28 – Seção de choque de captura do grupo térmico



Figura 5.30 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico



Figura 5.31 – Seção de choque de transporte do grupo rápido



Figura 5.32 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da temperatura do moderador, foram reescritas na tabela 5.4, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	2,283x10 ⁻³
	Térmico	$1,106x10^{-1} - 3,776x10^{-4}T_M + 6,874x10^{-7}T_M^2 - 4,175x10^{-10}T_M^3$
Total	Rápido	$5,266x10^{-1} + 3,195x10^{-7}T_M$
	Térmico	$2,324 - 6,388x10^{-3}T_M + 1,246x10^{-5}T_M^2 - 8,083x10^{-9}T_M^3$
Espalhamento	Rápido	$5,178x10^{-1} + 3,195x10^{-7}T_M$
	Térmico	$1,988 - 5,078x10^{-3}T_M + 1,076x10^{-5}T_M^2 - 7,663x10^{-9}T_M^3$
Absorção	Rápido	8,908x10 ⁻³
	Térmico	$1,790x10^{-1} - 6,259x10^{-4}T_M + 1,156x10^{-6}T_M^2 - 7,131x10^{-10}T_M^3$
Contura	Rápido	6,725x10 ⁻³
Cupturu	Térmico	$7,550x10^{-2} - 2,954x10^{-4}T_M + 5,683x10^{-7}T_M^2 - 3,653x10^{-10}T_M^3$
Nu-Fissão	Rápido	5,697x10 ⁻³
	Térmico	$2,763x10^{-1} - 9,616x10^{-4}T_M + 1,763x10^{-6}T_M^2 - 1,078x10^{-9}T_M^3$
Transporte	Rápido	$2,140x10^{-1}$
	Térmico	$1,024 - 1,536x10^{-3}T_M + 2,838x10^{-6}T_M^{-2} - 1,751x10^{-9}T_M^{-3}$
Espalhamento 1-1		$4,985x10^{-1} + 3,195x10^{-7}T_M$
Espalhamento 1-2		1,925x10 ⁻²
Espalhamento 2-2		$1,988 - 5,078x10^{-3}T_M + 1,076x10^{-5}T_M^2 - 7,663x10^{-9}T_M^3$

Tabela 5.4 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador (T_M)

.

5.4 - Parametrização com a Densidade do Moderador

Pela análise do comportamento das seções de choque macroscópicas representado pelas expansões polinomiais, descritas na tabela 5.5, pode-se observar que: as expansões polinomiais descritas em função da densidade do moderador nos mostra uma maior sensibilidade da seção de choque de fissão para ambos os grupos de energia, sendo mais acentuado para o grupo térmico, devido ao descrito nos itens 5.1 e 5.2. Nestas expansões, observamos que houve uma diminuição da densidade do moderador, o que reduz a quantidade de átomos do moderador por unidade de volume. Isto faz com que diminua a capacidade de moderação e por consequência menos nêutrons são termalizados. Com isso, o número de fissões induzidas diminui e o valor do fator de multiplicação abaixa. Este efeito, que ocorre no moderador, é descrito pelo chamado coeficiente de temperatura do moderador. O efeito da diminuição da densidade do moderador pode ser resumido da seguinte maneira: a densidade do moderador diminue e o fator de multiplicação de nêutrons também, conforme mostram as equações 5.17 e 5.18 e as figuras 5.34 e 5.35.

$$\sum_{f}^{R}(y) = 0,002208 - 0,000050y \tag{5.17}$$

$$\Sigma_{f}^{T}(y) = 0.036948 - 0.003217y + 0.010800y^{2} + 0.001133y^{3}$$
 (5.18)

Observa-se que o aumento da densidade do moderador causa um aumento na taxa de absorção de nêutron, conforme as funções 5.19 e 5.20 e as figuras 5.42 e 5.43.

$$\sum_{a}^{R}(y) = 0,008883 - 0,000500y + 0,000100y^{2} + 0,000200y^{3}$$
(5.19)

$$\sum_{a}^{T} (y) = 0,712954 - 0,008750y - 0,000300y^{2} + 0,003133y^{3}$$
(5.20)

Isto se explica pelo fator de haver uma maior concentração do moderador, o que aumenta a absorção e a seção de choque de captura, conforme as funções e 5.21 e 5.22 e as figuras 5.44 e 5.45,

$$\sum_{c}^{R}(y) = 0,006675 - 0,0004y + 0,0001y^{2} + 0,00020y^{3}$$
 (5.21)

$$\sum_{c}^{T}(y) = 0,006675 - 0,0004y + 0,0001y^{2} + 0,00020y^{3}$$
 (5.22)

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 5.23 e 5.24 e nas figuras 5.46 e 5.47.

$$v \sum_{f}^{R} (y) = 0,0056723 - 0,00035y + 0,00010y^{2} + 0,00020y^{3}$$
(5.23)

$$\nu \sum_{f}^{T} (y) = 0,1021631 - 0,0076963y + 0,0022333y^{2} + 0,0025925y^{3}$$
(5.24)

Observa-se que as seções de choque de espalhamento aumentam com a elevação da temperatura do moderador conforme as funções 5.25 e 5.26.

$$\sum_{s}^{R} (y) = 0.503600 + 0.068350y + 0.056000y^{2} + 0.048600y^{3}$$
(5.25)

$$\sum_{s}^{T} (y) = 1,123121 - 0,154639y + 0,189522y^{2} + 0,159733y^{3}$$
(5.26)

Isto ocorre devido o aumento do valor da densidade do moderador, aumentar a concentração do mesmo e por consequência aumenta a taxa das reações de espalhamento.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002208 - 0,000050y
	Térmico	$0,036948 - 0,003217y + 0,010800y^2 + 0,001133y^3$
Total	Rápido	$0,512408 - 0,141750y + 0,056200y^2 + 0,048800y^3$
	Térmico	$1,275568 - 0,484610y + 0,018922y^2 + 0,163067y^3$
Espalhamento	Rápido	$0,503600 + 0,068350y + 0,056000y^2 + 0,048600y^3$
	Térmico	$1,123121 - 0,154639y + 0,189522y^2 + 0,159733y^3$
Absorção	Rápido	$0,008883 - 0,000500y + 0,000100y^2 + 0,000200y^3$
	Térmico	$0,712954 - 0,008750y - 0,000300y^2 + 0,003133y^3$
Captura	Rápido	$0,006675 - 0,000400y + 0,000100y^2 + 0,000200y^3$
Cupturu	Térmico	$0,023956 - 0,005533y + 0,002100y^2 + 0,002000y^3$
Nu-Fissão	Rápido	$0,005672 - 0,000350y + 0,000100y^2 + 0,000200y^3$
110-115580	Térmico	$0,102163 - 0,007696y + 0,002233y^2 + 0,002593y^3$
Transporte	Rápido	$0,210592 - 0,034050y + 0,001350y^2 + 0,011800y^3$
	Térmico	$0,720540 - 0,270150y + 0,110267y^2 + 0,092000y^3$
Espalhamento 1-1		$0,485200 - 0,132550y + 0,052600y^2 + 0,045600y^3$
Espalhamento 1-2		$0,018375 - 0,008750y + 0,003500y^2 + 0,003000y^3$
Espalhamento 2-2		$1,123121 - 0,154639y + 0,189522y^2 + 0,159733y^3$

Tabela 5.5 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (d_M)



Figura 5.33 - Seção de choque de fissão do grupo rápido



Figura 5.34 - Seção de choque de fissão do grupo térmico





Figura 5.38 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 5.39 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 5.40 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico



Figura 5.41 – Seção de choque de absorção do grupo rápido



Figura 5.42 – Seção de choque de absorção do grupo térmico



Figura 5.43 – Seção de choque de captura do grupo rápido



Figura 5.44 – Seção de choque de captura do grupo térmico



Figura 5.45 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido





Figura 5.48 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da densidade do moderador, foram reescritas na tabela 5.6, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$2,418x10^{-3} - 2,592x10^{-4}D_M$
	Térmico	$1,571x10^{-1} - 1,761x10^{-1}D_M - 9,356x10^{-2}D_M^2 + 1,578x10^{-1}D_M^3$
Total	Rápido	$-1,520 + 1,022x10^{1}D_{M} - 1,502x10^{1}D_{M}^{2} + 6,798xD_{M}^{3}$
	Térmico	$-8,450 + 4,143x10^{I}D_{M} - 5,473x10^{I}D_{M}^{2} + 2,272x10^{I}D_{M}^{3}$
Espalhamento	Rápido	$-2,400 + 1,126x10^{1}D_{M} - 1,496x10^{1}D_{M}^{2} + 6,770xD_{M}^{3}$
	Térmico	$-6,730 + 3,480x10^{1}D_{M} - 4,901x10^{1}D_{M}^{2} + 2,225x10^{1}D_{M}^{3}$
Absorção	Rápido	$-2,087x10^{-3} + 4,796x10^{-2}D_M - 6,506x10^{-2}D_M^2 + 2,786x10^{-2}D_M^3$
	Térmico	$5,120x10^{-1} + 8,279x10^{-1}D_M - 1,069xD_M^2 + 4,364x10^{-1}D_M^3$
Captura	Rápido	$-4,715x10^{-3} + 4,848x10^{-2}D_M - 6,506x10^{-2}D_M^2 + 2,786x10^{-2}D_M^3$
Cupturu	Térmico	$-6,408x10^{-2} + 4,290x10^{-1}D_M - 6,210x10^{-1}D_M^2 + 2,786x10^{-1}D_M^3$
Nu-Fissão	Rápido	$-5,928x10^{-3} + 4,874x10^{-2}D_M - 6,506x10^{-2}D_M^{-2} + 2,786x10^{-2}D_M^{-3}$
110-115580	Térmico	$-1,843x10^{-2} + 5,748x10^{-1}D_M - 8,183x10^{-1}D_M^2 + 3,612x10^{-1}D_M^3$
Transporte	Rápido	$-4,978x10^{-1} + 3,004xD_M - 3,961xD_M^2 + 1,644xD_M^3$
	Térmico	$-3,022 + 1,906x10^{1}D_{M} - 2,820x10^{1}D_{M}^{2} + 1,282x10^{1}D_{M}^{3}$
Espalhamento 1-1		$-1,412 + 9,541xD_M - 1,403x10^1 D_M^2 + 6,352x D_M^3$
Espalhamento 1-2		$-1,056x10^{-1} + 6,258x10^{-1}D_M - 9,222x10^{-1}D_M^2 + 4,179x10^{-1}D_M^3$
Espalhamento 2-2		$-6,730 + 3,480x10^{1}D_{M} - 4,901x10^{1}D_{M}^{2} + 2,225x10^{1}D_{M}^{3}$

Tabela 5.6 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (D_M)

5.5 – Parametrização com a concentração de Boro

As expansões polinomiais apresentadas na tabela 5.7 descritas em função da concentração de boro revelaram um aumento da absorção e por consequência, uma diminuição do número de fissões, com o aumento da concentração de boro.

O ácido bórico (H₃BO₃) possui uma elevada seção de choque para captura de nêutrons, exibida pelo ${}^{10}_{5}B$ (isótopo que constitui 20% do boro natural), e isto causa um aumento na absorção de nêutrons, alterando o fator de multiplicação k, conforme as equações 5.27 e 5.28 e as figuras 5.50 e 5.51.

$$\sum_{f}^{R}(y) = 0,002184 \tag{5.27}$$

$$\sum_{f}^{T} (y) = 0.041875 + 0.000083y + 0.0002y^{2} - 0.0006y^{3}$$
 (5.28)

Observa-se também que o aumento da concentração de boro causou um aumento na taxa de absorção, tanto para a faixa térmica quanto para a rápida, conforme as funções 5.29 e 5.30.

$$\sum_{a}^{R}(y) = 0,008934 + 0,00005y$$
 (5.29)

$$\sum_{a}^{T} (y) = 0,068364 - 0,000183y - 0,0008y^{2} + 0,002733y^{3}$$
 (5.30)

Analogamente há um aumente da captura, conforme as funções abaixo,

$$\sum_{c}^{R} (y) = 0,006725 + 0,00005y$$
 (5.31)

$$\sum_{c}^{T}(y) = 0,026468 - 0,000176y - 0,0010y^{2} + 0,003312y^{3}$$
(5.32)

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções representadas pelas equações 5.33 e 5.34.

$$\nu \sum_{f}^{R} (y) = 0,005698 \tag{5.33}$$

$$\nu \sum_{f}^{T} (y) = 0.102068 + 0.000017y + 0.0005y^{2} - 0.001267y^{3}$$
 (5.34)

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002184
	Térmico	$0,041875 + 0,000083y + 0,000200y^2 - 0,000600y^3$
Total	Rápido	0,526808 - 0,0000008y
	Térmico	$1,237687 - 0,000150y + 0,001367y^2 - 0,004067y^3$
Espalhamento	Rápido	0,517950
	Térmico	$1,166215 + 0,000478y + 0,002333y^2 - 0,006800y^3$
Absorção	Rápido	0,008934 + 0,000050y
	Térmico	$0,068364 - 0,000183y - 0,000800y^2 + 0,002733y^3$
Captura	Rápido	0,006725 + 0,000050y
Cuptulu	Térmico	$0,026468 - 0,000176y - 0,001000y^2 + 0,003312y^3$
Nu-Fissão	Rápido	0,005698
Inu-1/188a0	Térmico	$0,102068 + 0,000017y + 0,000500y^2 - 0,001267y^3$
Transporte	Rápido	0,214066
	Térmico	$0,745320 + 0,001261y + 0,001533y^2 - 0,004400y^3$
Espalhamento 1-1		0,498700
Espalhamento 1-2		0,019250
Espalhamento 2-2		$1,166215 + 0,000478y + 0,002333y^2 - 0,006800y^3$

Tabela 5.7 – Seções de Choque em função da concentração de B^{10} (C_b)



Figura 5.49 - Seção de choque de fissão do grupo rápido







Figura 5.53 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido



Figura 5.54 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 5.55 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 5.56 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico



Figura 5.57 - Seção de choque de absorção do grupo rápido



Figura 5.58 – Seção de choque de absorção do grupo térmico







Figura 5.62 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico



Figura 5.64 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da concentração de boro, foram reescritas na tabela 5.8, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$2,184x10^{-3}$
	Térmico	$4,507x10^{-2} - 1,489x10^{-5}C_{b} + 2,276x10^{-8}C_{b}^{-2} - 1,138x10^{-11}C_{b}^{-3}$
Total	Rápido	$5,268x10^{-1} - 2,667x10^{-9}C_b$
	Térmico	$1,261 - 1,092x10^{-4}C_b + 1,544x10^{-7}C_b^2 - 7,715x10^{-11}C_b^3$
Espalhamento	Rápido	5,180x10 ⁻¹
	Térmico	$1,203 - 1,706x10^{-4}C_b + 2,584x10^{-7}C_b^2 - 1,290x10^{-10}C_b^3$
Absorção	Rápido	$8,851x10^{-3} + 1,334x10^{-7}C_b$
	Térmico	$5,379x10^{-2} + 6,737x10^{-5}C_b - 1,029x10^{-7}C_b^2 + 5,185x10^{-11}C_b^3$
Contura	Rápido	$6,642x10^{-3} + 1,334x10^{-7}C_b$
Cupturu	Térmico	$8,649x10^{-3} + 8,203x10^{-5}C_b - 1,249x10^{-7}C_b^2 + 6,283x10^{-11}C_b^3$
Nu-Fissão	Rápido	5,698x10 ⁻³
	Térmico	$1,093x10^{-1} - 3,256x10^{-5}C_b + 4,862x10^{-8}C_b^2 - 2,404x10^{-11}C_b^3$
Transporte	Rápido	2,141x10 ⁻¹
	Térmico	$7,678x10^{-1} - 1,081x10^{-4}C_b + 1,674x10^{-7}C_b^2 - 8,347x10^{-11}C_b^3$
Espalhamento 1-1		4,987x10 ⁻¹
Espalhamento 1-2		$1,925x10^{-2}$
Espalhamento 2-2		$1,203 - 1,706x10^{-4}C_b + 2,584x10^{-7}C_b^2 - 1,290x10^{-10}C_b^3$

Tabela 5.8 – Seções de Choque em função da concentração de $B^{10}\left(C_{b}\right)$

5.6 – Parametrização com o Enriquecimento de $\frac{235}{92}U$ (E)

As expansões apresentadas na tabela 5.9, descritas em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U$ revelam um aumento do número de fissões com o aumento do enriquecimento, tanto para o grupo rápido quanto para o grupo térmico, o que confirma que as funções 5.35 e 5.36 estão coerentes com a teoria.

$$\sum_{f}^{R}(y) = 0,002400 + 0,000650y \tag{5.35}$$

$$\Sigma_f^T(y) = 0.046803 + 0.014183y - 0.001600y^2 + 0.000200y^3$$
 (5.36)

Observa-se que o aumento do enriquecimento causou um aumento na taxa de absorção, tanto para a faixa térmica quanto para a rápida, conforme as funções abaixo.

$$\sum_{a}^{R} (y) = 0,009184 + 0,000800y$$
 (5.37)

$$\sum_{a}^{T} (y) = 0,022972 + 0,005166y + 0,034663y^{2} - 0,034667y^{3}$$
(5.38)

Analogamente há um aumento da captura, conforme as funções 5.39 e 5.40 abaixo,

$$\Sigma_c^R(y) = 0,006759 + 0,000150y \tag{5.39}$$

$$\sum_{c}^{T}(y) = 0.026468 - 0.000176y - 0.0010y^{2} + 0.003312y^{3}$$
(5.40)

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 5.41 e 5.42 e nas figuras :

$$\nu \sum_{f}^{R} (y) = 0,006225 + 0,001550y - 0,000100y^{2}$$
 (5.41)

$$v \sum_{f}^{T} (y) = 0.114090 + 0.034381y - 0.004000y^{2} + 0.000600y^{3}$$
 (5.42)

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002400 + 0,000650y
	Térmico	$0,046803 + 0,014183y - 0,001600y^2 + 0,000200y^3$
Total	Rápido	0,526525 - 0,000850y
	Térmico	$1,235385 - 0,007052y + 0,002600y^2 - 0,000400y^3$
Espalhamento	Rápido	0,517400 - 0,001650y
	Térmico	$1,158648 - 0,022238y + 0,004366y^2 - 0,000600y^3$
Absorção	Rápido	0,009184 + 0,000800y
	Térmico	$0,073541 + 0,015331y - 0,001700y^2 + 0,000200y^3$
Captura	Rápido	0,006759 + 0,000150y
Cuptoru	Térmico	$0,022972 + 0,005166y + 0,034663y^2 - 0,034667y^3$
Nu-Fissão	Rápido	$0,006225 + 0,001550y - 0,000100y^2$
	Térmico	$0,114090 + 0,034381y - 0,004000y^2 + 0,000600y^3$
Transporte	Rápido	0,213900 - 0,000500y
	Térmico	$0,738637 - 0,018055y + 0,004866y^2 - 0,001000y^3$
Espalhamento 1-1		0,498350 - 0,001050y
Espalhamento 1-2		0,019050 - 0,000600y
Espalhamento 2-2		$1,158648 - 0,022238y + 0,004366y^2 - 0,000600y^3$

Tabela 5.9 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U(E)$







Figura 5.66 – Seção de choque de fissão do grupo térmico



Figura 5.68 – Seção de choque total do grupo térmico



Figura 5.69 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido



Figura 5.70 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 5.71 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 5.72 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico







Figura 5.74 – Seção de choque de absorção do grupo térmico



Figura 5.76 – Seção de choque de captura do grupo térmico





Figura 5.79 – Seção de choque de transporte do grupo rápido



Figura 5.80 - Seção de choque de transporte do grupo térmico
Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função do enriquecimento, foram reescritas na tabela 5.10, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$8,834x10^{-4} + 4,334x10^{-4}E$
	Térmico	$2,458x10^{-3} + 1,661x10^{-2}E - 1,333x10^{-3}E^{2} + 5,927x10^{-5}E^{3}$
Total	Rápido	$5,285x10^{-1} - 5,667x10^{-4}E$
	Térmico	$1,271 - 1,715x10^{-2}E + 2,400x10^{-3}E^{2} - 1,185x10^{-4}E^{3}$
Espalhamento	Rápido	$5,212x10^{-1} - 1,100x10^{-3}E$
	Térmico	$1,242 - 3,494x10^{-2}E + 3,807x10^{-3}E^2 - 1,778x10^{-4}E^3$
Absorção	Rápido	$7,317x10^{-3} + 5,334x10^{-4}E$
	Térmico	$2,597x10^{-2} + 1,769x10^{-2}E - 1,378x10^{-3}E^{2} + 5,927x10^{-5}E^{3}$
Captura	Rápido	$6,409x10^{-3} + 1,000x10^{-4}E$
	Térmico	$6,400x10^{-1} - 4,819x10^{-1}E + 1,233x10^{-1}E^2 - 1,027x10^{-2}E^3$
Nu-Fissão	Rápido	$2,064x10^{-3} + 1,345x10^{-3}E - 4,445x10^{-5}E^2$
	Térmico	$2,407x10^{-2} + 3,070x10^{-2}E - 2,045x10^{-3}E^{2} + 1,778x10^{-4}E^{3}$
Transporte	Rápido	$2,151x10^{-1} - 3,334x10^{-4}E$
	Térmico	$8,200x10^{-1} - 3,807x10^{-2}E + 5,274x10^{-3}E^2 - 2,963x10^{-4}E^3$
Espalhamento 1-1		$5,008x10^{-1} - 7,000x10^{-4}E$
Espalhamento 1-2		$2,045x10^2 - 4,000x10^{-4}E$
Espalhamento 2-2		$1,242 - 3,494x10^{-2}E + 3,807x10^{-3}E^2 - 1,778x10^{-4}E^3$

Tabela 5.10 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $\frac{^{235}}{_{92}}U$

5.7 – Parametrização em função da Temperatura e Correspondente Densidade do *Moderador*

Nesta análise as funções de seção de choque são escritas na tabela 5.11,em função da temperatura do moderador, associada ao valor da densidade relativa a essa temperatura mantendo-se os demais parâmetros com os valores de referencia descritos na tabela 2.2

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002234 – 0,000050y
	Térmico	$0,046917 - 0,005178y - 0,000634y^2 - 0,000867y^3$
Total	Rápido	$0,614491 - 0,066050y - 0,046000y^2 - 0,026800y^3$
	Térmico	$1,570229 - 0,296957y - 0,126512y^2 - 0,085066y^3$
Fsnalhamento	Rápido	$0,605350 - 0,065950y - 0,045800y^2 - 0,026600y^3$
Espaniamento	Térmico	$1,493772 - 0,286997y - 0,124761y^2 - 0,082488y^3$
Absorção	Rápido	$0,009475 - 0,000100y - 0,000200y^2 - 0,000200y^3$
	Térmico	$0,076409 - 0,010445y - 0,001734y^2 - 0,001867y^3$
Captura	Rápido	$0,006959 - 0,000050y - 0,000200y^2 - 0,000200y^3$
	Térmico	$0,029459 - 0,005316y - 0,001034y^2 - 0,001000y^3$
Nu-Fissão	Rápido	$0,005873 - 0,000150y - 0,000100y^2$
	Térmico	$0,486521 - 0,012662y - 0,001500y^2 - 0,002200y^3$
Transporte	Rápido	$0,235075 - 0,01585y - 0,011000y^2 - 0,006400y^3$
	Térmico	$0,929891 - 0,156512y - 0,076722y^2 - 0,046133y^3$
Espalhamento 1-1		$0,580683 - 0,061850y - 0,043000y^2 - 0,025000y^3$
Espalhamento 1-2		$0,024650 - 0,004100y - 0,002800y^2 - 0,001600y^3$
Espalhamento 2-2		$1,493772 - 0,286997y - 0,124761y^2 - 0,082488y^3$

Tabela 5.11 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do moderador







Figura 5.82 - Seção de choque de fissão do grupo térmico





Figura 5.85 - Seção de choque de espalhamento do grupo rápido



Figura 5.86 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 5.87 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 5.88 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico





Figura 5.92 – Seção de choque de captura do grupo térmico







Figura 5.94 - Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico







Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da temperatura e respectiva densidade, foram reescritas na tabela 5.12, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$2,380x10^{-3} - 3,195x10^{-7}T_M$
	Térmico	$7,814x10^{-2} - 1,509x10^{-4}T_M + 2,839x10^{-7}T_M^{-2} - 2,262x10^{-10}T_M^{-3}$
Total	Rápido	$1,081 - 3,078x10^{-3}T_M + 7,698x10^{-6}T_M^2 - 6,993x10^{-9}T_M^{-3}$
	Térmico	$3,471 - 1,106x10^{-2}T_M + 2,523x10^{-5}T_M^2 - 2,220x10^{-8}T_M^3$
Espalhamento	Rápido	$1,068 - 3,053x10^{-3}T_M + 7,634x10^{-6}T_M^2 - 6,940x10^{-9}T_M^3$
	Térmico	$3,317 - 1,064x10^{-2}T_M + 2,438x10^{-5}T_M^2 - 2,152x10^{-8}T_M^3$
Absorção	Rápido	$1,303x10^{-2} - 2,580x10^{-5}T_M + 6,330x10^{-8}T_M^2 - 5,218x10^{-11}T_M^3$
	Térmico	$1,385x10^{-1} - 3,066x10^{-4}T_M + 5,963x10^{-7}T_M^2 - 4,871x10^{-10}T_M^3$
Captura	Rápido	$1,037x10^{-2} - 2,548x10^{-5}T_M + 6,330x10^{-8}T_M^2 - 5,218x10^{-11}T_M^3$
	Térmico	$6,099x10^{-2} - 1,585x10^{-4}T_M + 3,151x10^{-7}T_M^{-2} - 2,609x10^{-10}T_M^{-3}$
Nu-Fissão	Rápido	$5,460x10^{-3} + 2,769x10^{-6}T_M - 4,083x10^{-9}T_M^{-2}$
	Térmico	$5,653x10^{-1} - 3,838x10^{-4}T_M + 7,248x10^{-7}T_M^2 - 5,740x10^{-10}T_M^3$
Transporte	Rápido	$3,466x10^{-1} - 7,351x10^{-4}T_M + 1,838x10^{-6}T_M^2 - 1,670x10^{-9}T_M^3$
	Térmico	$1,879 - 5,665x10^{-3}T_M + 1,335x10^{-5}T_M^2 - 1,204x10^{-8}T_M^3$
Espalhamento 1-1		$1,016 - 2,870x10^{-3}T_M + 7,177x10^{-6}T_M^2 - 6,523x10^{-9}T_M^3$
Espalhamento 1-2		$5,249x10^{-2} - 1,828x10^{-4}T_M + 4,574x10^{-7}T_M^2 - 4,175x10^{-10}T_M^3$
Espalhamento 2-2		$3,317 - 1,064x10^{-2}T_M + 2,438x10^{-5}T_M^2 - 2,152x10^{-8}T_M^{-3}$

Tabela 5.12 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do moderador

CAPÍTULO 6

CÁLCULOS PARA O ELEMENTO COMBUSTÍVEL COM VENENO QUEIMÁVEL

6.1 – Introdução

A adição de certos materiais absorvedores de nêutrons, em um reator nuclear, os quais controlam o excesso de reatividade do núcleo tem como propósito a obtenção de um melhor desempenho do reator. Esses materiais são conhecidos como "veneno queimável" e possuem alta seção de choque de absorção, podendo ser utilizados sob dois aspectos: de forma homogênea, ou seja, misturado uniformente ao refrigerante, ou de forma heterogenea, onde são posicionados em varetas alternadas ao combustível, no elemento combustível. Os principais materiais usados como veneno queimável são o boro e algumas Terras Raras.

As Terras Raras são muito usadas na indústria nuclear, tanto na forma metálica, como em dispersões de fase cerâmica em matrizes metálicas. Dentre elas as que possuem maior aplicação são o Eu^{151} , Sm^{150} , Dy^{161} , Gd^{157} , e dentre estes, o mais comum para reatores tipo PWR, é o óxido Gd_2O_3 , adicionado ao UO_2 .

Neste capítulo, são apresentadas em tabelas as expansões polinomiais das seções de choque macroscópicas homogeneizadas de um elemento combustível contendo varetas combustíveis absorvedoras de Gd₂O₃ em função dos mesmos parâmetros descritos no capítulo 5.

É também apresentada uma descrição gráfica para cada seção de choque de forma individualizada, por meio das figuras 6.1 a figura 6.96, apresentadas em cada item, sendo que nas equações parametrizadas apresentadas nas tabelas deste capítulo, y significa o argumento o qual provém de uma transformação linear segundo a equação:

$$y = \frac{2Y - Y_{\min} - Y_{\max}}{Y_{\max} - Y_{\min}}$$
(6.1)

onde Y significa o valor real do parâmetro de estado podendo ser a temperatura do moderador, temperatura do combustível, densidade do moderador, concentração de

boro e o enriquecimento de ${}^{235}_{92}U$. Y_{max} e Y_{min} são os valores máximo e mínimo de cada intervalo dos parâmetros.

As expansões polinomiais apresentadas nas tabelas deste capítulo foram escritas com os coeficientes contendo valores até seis casas decimais, desprezando-se os coeficientes que apresentaram valores menores que 10^{-6} .

É também apresentada neste capítulo uma descrição gráfica para cada seção de choque de forma individualizada, para cada expansão polinomial.

6.2 – Parametrização com a Temperatura do Combustível

Neste item, é apresentada uma descrição do comportamento das seções de choque em função da variação da temperatutra do combustível, por meio de uma representação gráfica da expansão polinomial, e por meio de uma interpretação teórica dos resultados.

As funções parametrizadas de seção de choque, em função da temperatura do combustível, são descritas na tabela 6.1, onde o argumento y provém de uma transformação linear representada na equação 6.1, sendo seus valores variando de -1 a 1. Analogamente ao capítulo anterior, Y é igual a $\sqrt{t_F}$, sendo t_F a temperatura do combustível em Kelvis. Os valores de t_{F max} e t_{F min} para esta análise são respectivamente 1473 K e 573 K, onde os mesmos significam os pontos maximo e mínimo do intervalo de análise.

Pela a análise do comportamento das seções de choque macroscópicas, representada pelas expansões polinomiais, com a presença de Gd_2O_3 – UO_2 na célula homogeneizada, descritas na tabela 6.1, pode-se observar que:

A seção de choque de fissão, para o grupo rápido, é muito pouco sensível com a variação da temperatura do combustível, mantendo-se praticamente com valores constantes. Já para o grupo térmico, a secão de choque de fissão diminue com o aumento da temperatura, conforme as funções 6.2 e 6.3 e as figuras 6.1 e 6.2, considerando significativa a contribuição dos termos até seis casas decimais.

$$\sum_{f}^{R} (y) = 0,002300 \tag{6.2}$$

$$\sum_{f}^{T} = 0.039943 - 0.000100y + 0.000100y^{2} - 0.000001y^{3}$$
 (6.3)

Os comportamentos das expansões de seção de choque de fissão, do grupo rápido e do grupo térmico, estão de acordo com o esperado, já que os dois fenômenos em conjunto (presença de um absorvedor e o efeito Doppler) favorecem a diminuição do número de fissão, devido ao aumento da temperatura do combustível.

Podemos observar esse aumento da taxa de absorção pela figura 6.9 e pela função 6.4 abaixo:

$$\sum_{a}^{R} (y) = 0,009900 + 0,000250y \tag{6.4}$$

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 6.5 e 6.6.

$$\nu \sum_{f}^{R} (y) = 0,005948 \tag{6.5}$$

$$v \sum_{f}^{T} (y) = 0,097376 - 0,000400y$$
 (6.6)

Como neste caso houve uma diminuição do número de fissões e um aumento na taxa de absorção, por consequência houve um aumento na ocorrência da captura radioativa.

Observa que as funções da seção de choque de captura, para ambos os grupos atendem a esse comportamento, ou seja, há um aumento da taxa de ocorrência da captura radioativa, conforme a função 6.7, da seção de choque da captura radioativa, abaixo descrita:

$$\sum_{c}^{R}(y) = 0,007564 + 0,010180y - 0,000111y^{2} + 0,000185y^{3}$$
(6.7)

Para reatores térmicos o efeito Doppler costuma causar uma elevação da ressonância de captura em materiais férteis no combustível.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002300
	Térmico	$0,039943 - 0,000100y + 0,000100y^2 - 0,000001y^3$
Total	Rápido	0,524183 + 0,000450y
	Térmico	$1,175779 - 0,001695y - 0,000778y^2 + 0,001209y^3$
Espalhamento	Rápido	0,514269 + 0,000117y
Total	Térmico	$1,087917 - 0,000023y + 0,000166y^2 + 0,000097y^3$
Absorção	Rápido	0,009900 + 0,000250y
	Térmico	$0,087966 - 0,000252y + 0,000052y^2 + 0,000052y^3$
Captura	Rápido	$0,007564 + 0,000180y + 0,000067y^2 + 0,000185y^3$
Cupturu	Térmico	0,048050 - 0,000050y
Nu-Fissão	Rápido	0,005948
	Térmico	0,097376 - 0,000400y
Transporte	Rápido	0,221116 - 0,000100y
	Térmico	$0,704667 - 0,000038y - 0,000200y^3$
Espalhamento 1-1		$0,496775 + 0,000400y - 0,000100y^2$
Espalhamento 1-2		0,017625 - 0,000200y
Espalhamento 2-2		$1,087917 - 0,000023y + 0,000166y^2 + 0,000097y^3$

Tabela 6.1 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (t_C)

As figuras 6.1, 6.2, 6.3 e 6.4 mostram as funções de seção de choque parametrizadas no intervalo de temperatura de 573 a 1473 K, para o grupo rápido e o grupo térmico.

Conforme descrito anteriormente, as figuras abaixo apresentam as funções parametrizadas, de forma individualizada, para que se proporcione uma visão mais clara do comportamento das seções de choque em função da temperatura do combustível. Nestas figuras, são apresentadas as expansões polinomiais onde os valores dos coeficientes são escritos sem limite de casas decimais.



Figura 6.1 – Seção de choque de fissão do grupo rápido.

Conforme descrito anteriormente, pode-se observar o decréscimo da seção de choque de fissão do grupo rápido com o aumento da temperatura do combustível, devido ao efeito Doppler, que aumenta absorção e diminue o número de fissões. Ressalta-se também que a presença de varetas combustíveis de UO₂-Gd₂O₃ também contribui com essa redução do número de fissões, devido a absorção também aumentar.



Figura 6.2 – Seção de choque de fissão do grupo térmico

Conforme já citado no item 6.2, a seção de choque de fissão do grupo térmico também se comporta de forma análoga, onde ela diminue seu valor com o aumento da temperatura do combustível, de forma mais acentuada do que o grupo rápido. Isto ocorre devido a um aumento da captura ressonante do $^{238}_{92}U$ com o efeito Doppler e com um correspondente decréscimo na alto-blindagem, e por consequência um aumento da ressonância de absorção. O alargamento da ressonância de absorção faz com que haja um aumento na taxa de absorção e, por consequência, ocorre uma diminuição no número de fissões no combustível nuclear.

Como uma consequência do aumento da absorção pode-se visualizar o aumento da seção de choque total do grupo rápido.



Figura 6.3 – Seção de choque total do grupo rápido.



Figura 6.4 - Seção de choque total do grupo térmico



Figura 6.5 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido

Pode-se observar que a seção de choque de espalhamento aumenta com a elevação da temperatura do combustível, o que fisicamente é esperado já que a elevação da temperatura aumenta a enegia cinética da partícula e com isso o número de colisões. Neste caso também se observa que embora o aumento da temperatura aumente à absorção devido ao efeito Doppler, a ressonância de absorção não pertuba a forma de moderação do fluxo, pois o espalhamento do hidrogênio.



Figura 6.6 – Seção de choque de espalhamento do grupo 1 (rápido) para o grupo 1



Figura 6.7 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 6.8 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico



Figura 6.9 - Seção de choque de absorção do grupo rápido



Figura 6.10 - Seção de choque de absorção do grupo térmico



Figura 6.11 - Seção de choque de captura do grupo rápido



Figura 6.13 – Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido



Figura 6.15 – Seção de choque de transporte do grupo rápido



Figura 6.16 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da temperatura do combustível, foram reescritas na tabela 6.2, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$2,3x10^{-3}$
	Térmico	$4,186x10^{-2} - 4,673x10^{-6}T_F + 3,854x10^{-9}T_F^{-2} - 1,094x10^{-12}T_F^{-3}$
Total	Rápido	$5,232x10^{-1} + 9,990x10^{-7}T_F$
	Térmico	$1,161 + 4,570x10^{-5}T_F - 4,447x10^{-8}T_F^2 + 1,323x10^{-11}T_F^3$
Espalhamento	Rápido	$5,140x10^{-1} + 2,597x10^{-7}T_F$
Total	Térmico	$1,088 + 1,612x10^{-6}T_F - 2,442x10^{-9}T_F^2 + 1,061x10^{-12}T_F^3$
Absorção	Rápido	$9,332x10^{-3} + 5,550x10^{-7}T_F$
	Térmico	$8,820x10^{-2} + 7,054x10^{-7}T_F - 1,492x10^{-9}T_F^2 + 5,689x10^{-13}T_F^3$
Conturo	Rápido	$5,328x10^{-3} + 6,091x10^{-6}T_F - 5,888x10^{-9}T_F^2 + 2,024x10^{-12}T_F^3$
Cupturu	Térmico	$4,816x10^{-2} - 1,110x10^{-7}T_F$
Nu-Fissão	Rápido	5,948x10 ⁻³
	Térmico	$9,829x10^{-2} - 8,880x10^{-7}T_F$
Transporte	Rápido	$2,213x10^{-1} - 2,220x10^{-7}T_F$
	Térmico	$7,071x10^{-1} - 6,968x10^{-6}T_F + 6,722x10^{-9}T_F^{-2} - 2,188x10^{-12}T_F^{-3}$
Espalhamento 1-1		$4,953x10^{-1} + 1,897x10^{-6}T_F - 4,928x10^{-10}T_F^2$
Espalhamento 1-2		$1,808x10^{-2} - 4,440x10^{-7}T_F$
Espalhamento 2-2		$1,088 + 1,612x10^{-6}T_F - 2,442x10^{-9}T_F^2 + 1,061x10^{-12}T_F^3$

Tabela 6.2 – Seções de Choque em função da temperatura de combustível (T_F)

6.3 – Parametrização com a Temperatura do Moderador

As funções parametrizadas de seção de choque, em função da temperatura do moderador, são descritas na tabela 6.3, onde o argumento y provém de uma transformação linear, representada na equação 6.1. Nesta expressão t_M é a temperatura do moderador em Kelvis. Os valores de $t_{M max}$ e $t_{M min}$ para esta análise são respectivamente 300 K e 613 K, onde os mesmos significam os pontos maximo e mínimo do intervalo de análise.

Pela análise do comportamento das seções de choque macroscópicas representado pelas expansões polinomiais, descritas na tabela 6.3, pode-se observar que:

A seção de choque de fissão tem um comportamento similar ao descrito no item anterior, sendo para o grupo rápido, muito pouco sensível com a variação da temperatura, mantendo-se praticamente com valores constantes, mas diminuindo para o grupo térmico, conforme as funções 6.8 e 6.9.

$$\sum_{f}^{R} (y) = 0,002283 \tag{6.8}$$

$$\sum_{f}^{T} (y) = 0.039823 + 0.007989y + 0.002333y^{2} - 0.014000y^{3}$$
 (6.9)

Conforme foi explicado no item 6.2, o aumento da temperatura adicionado a presença das varetas absorvedoras de Gd_2O_3 – UO_2 , conduz a um aumento na taxa de absorção e,por conseqüência, ocorre uma diminuição no número de fissões no combustível nuclear.

É importante observar que o fato de se relatar que a seção de choque teve pouca sensibilidade e os valores terem ficado praticamente constante, é porque o decréscimo ou o aumento da seção de choque em função de um parâmetro ocorreu com valores muito pequenos, os quais estão sendo desprezados por motivo de manuseio e de relevância na manipulação dos resultados.

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 6.10 e 6.11.

$$\nu \sum_{f}^{R} (y) = 0,005947 \tag{6.10}$$

$$v \sum_{f}^{T} (y) = 0,0642545 + 0,0019888y - 0,0025666y^{2} + 0,0009333y^{3}$$
(6.11)

Observa-se que a seção de choque de absorção na faixa rápida foi pouco sensível ao aumento da temperatura, não havendo variação significativa na taxa de absorção de nêutrons, conforme descreve a função 6.12 abaixo:

$$\sum_{a}^{R}(y) = 0,009883 \tag{6.12}$$

Podemos observar que embora o comportamento da seção de choque de absorção seja similar ao ocorrido na análise do elemento combustível sem a presença de veneno queimável, o valor da seção de choque de absorção é bem superior ao anterior. Isto se explica devido ao aumento da taxa de absorção com a presença do veneno queimável.

Na faixa térmica, a seção de choque de absorção sofreu um aumento, diferenciando do caso sem veneno queimável, quando absorção sofreu um decréscimo devido ao moderador. Podemos ver na função 6.13,

$$\sum_{a}^{T} = 0.008771 - 0.003645y + 0.003600y^{2} - 0.001733y^{3}$$
 (6.13)

As funções da seção de choque de captura neste caso, para ambos os grupos, acampanhou o mesmo comportamento da seção de choque de absorção, conforme se pode constatar nas funções 6.14 abaixo:

$$\sum_{c}^{R} (y) = 0,007600 \tag{6.14}$$

$$\sum_{c}^{T}(y) = 0,008771 - 0,003645y + 0,003600y^{2} - 0,001733y^{3}$$
 (6.15)

Observa-se que as seções de choque de espalhamento diminue com a elevação da temperatura do moderador conforme as funções 6.16 e 6.17 abaixo.

$$\sum_{s}^{R}(y) = 0.514294 + 0.000250y - 0.000100y^{2} - 0.000200y^{3}$$
(6.16)

$$\Sigma_s^T(y) = 1,087043 - 0,006468y + 0,020933y^2 - 0,017835y^3$$
(6.17)

Isto se explica devido a uma redução na taxa de espalhamento pelo aumento da absorção.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002283
	Térmico	$0,039823 + 0,007989y + 0,002333y^2 - 0,014000y^3$
Total	Rápido	$0,524066 - 0,000206y + 0,000341y^3$
	Térmico	$1,174640-0,009911y+0,025625y^2-0,011884y^3$
Espalhamento	Rápido	$0,514294 + 0,000250y - 0,000100y^2 - 0,000200y^3$
	Térmico	$1,087043 - 0,006468y + 0,020933y^2 - 0,017835y^3$
Absorção	Rápido	0,009883
	Térmico	$0,08771 - 0,003645y + 0,003600y^2 - 0,001733y^3$
Captura	Rápido	0,007600
Captura	Térmico	$0,047950 - 0,001017y + 0,001167y^2 - 0,000400y^3$
Nu-Fissão	Rápido	0,005947
	Térmico	$0,047950 - 0,001017y + 0,001167y^2 - 0,000400y^3$
Transporte	Rápido	0,221103
Transporte	Térmico	$0,705074 - 0,002859y + 0,005866y^2 - 0,004222y^3$
Fluxo Total	Rápido	0,3179204
	Térmico	$0,0642545 + 0,0019888y - 0,0025666y^2 + 0,0009333y^3$
Espalhamento 1-1		$0,496725 + 0,000250y - 0,000100y^2 - 0,000200y^3$
Espalhamento 1-2		0,017608
Espalhamento 2-2		$1,087043 - 0,006468y + 0,020933y^2 - 0,017607y^3$

Tabela 6.3 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador ($T_{M}\,)$











Figura 6.21 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido



Figura 6.22 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 6.23 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 6.24 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico









Figura 6.28 – Seção de choque de captura do grupo térmico



Figura 6.30 - Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico






Figura 6.32 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da temperatura do moderador, foram reescritas na tabela 6.4, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	2,283x10 ⁻³
	Térmico	$3,838x10^{-1} - 2,319x10^{-3}T_M + 5,098x10^{-6}T_M^2 - 3,653x10^{-9}T_M^3$
Total	Rápido	$5,162x10^{-1} + 5,430x10^{-5}T_M - 1,218x10^{-7}T_M^2 + 8,897x10^{-11}T_M^3$
	Térmico	$1,717 - 2,957x10^{-3}T_M + 5,293x10^{-6}T_M^2 - 3,101x10^{-9}T_M^{-3}$
Espalhamento	Rápido	$5,177x10^{-1} - 2,730x10^{-5}T_M + 6,738x10^{-8}T_M^2 - 5,218x10^{-11}T_M^3$
	Térmico	$1,727 - 3,731x10^{-3}T_M + 7,227x10^{-6}T_M^2 - 4,653x10^{-9}T_M^3$
Absorção	Rápido	9,883x10 ⁻³
	Térmico	$1,720x10^{-1} - 4,402x10^{-4}T_M + 7,662x10^{-7}T_M^2 - 4,522x10^{-10}T_M^3$
Conturo	Rápido	$7,6x10^{-3}$
Captura	Térmico	$7,077x10^{-2} - 1,152x10^{-4}T_M + 1,906x10^{-7}T_M^2 - 1,044x10^{-10}T_M^3$
Nu-Fissão	Rápido	5,947x10 ⁻³
110-115580	Térmico	$2,406x10^{-1} - 7,875x10^{-4}T_M + 1,433x10^{-6}T_M^2 - 8,696x10^{-10}T_M^3$
Transporte	Rápido	2,211x10 ⁻¹
Transporte	Térmico	$8,681x10^{-1} - 9,256x10^{-4}T_M + 1,748x10^{-6}T_M^2 - 1,102x10^{-9}T_M^3$
Fluxo Total	Rápido	3,179x10 ⁻¹
	Térmico	$1,346x10^{-2} + 2,606x10^{-4}T_M - 4,382x10^{-7}T_M^2 + 2,434x10^{-10}T_M^3$
Espalhamento 1-1		$5,001x10^{-1} - 2,730x10^{-5}T_M + 6,738x10^{-8}T_M^2 - 5,218x10^{-11}T_M^3$
Espalhamento 1-2		$1,761x10^2$
Espalhamento 2-2		$1,727 - 3,731x10^{-3}T_M + 7,227x10^{-6}T_M^2 - 4,653x10^{-9}T_M^3$

Tabela 6.4 – Seções de Choque em função da temperatura do moderador (T_M)

6.4 - Parametrização com a Densidade do Moderador

As expansões polinomiais apresentadas na tabela 6.5 descritas em função da densidade do moderador nos mostram uma maior sensibilidade da seção de choque de fissão para ambos os grupos de energia, sendo mais acentuado para o grupo térmico, devido ao descrito nos itens 5.1 e 5.2. Nesta observa-se que a presença das varetas absorvedoras reduz a quantidade de nêutrons fazendo com que reduza o número de fissões. Observa-se também que com a diminuição da densidade do moderador, ocorre uma diminuição da quantidade de átomos do moderador por unidade de volume, o que reduz também a capacidade de moderação, e por consequência menos nêutrons são termalizados. Isso faz co que o número de fissões induzidas diminua e o valor do fator de multiplicação abaixe. Este efeito, que ocorre no moderador, é descrito pelo chamado coeficiente de temperatura do moderador. O efeito da diminuição da densidade do moderador pode ser resumido da seguinte maneira: a densidade do moderador diminue e o fator de multiplicação de nêutrons também.

$$\sum_{f}^{R}(y) = 0,002384 + 0,00005y - 0,0001y^{2}$$
(6.18)

$$\Sigma_{f}^{T}(y) = 0.043358 + 0.00145y - 0.0024y^{2} + 0.001467y^{3}$$
 (6.19)

Observa-se que o aumento da densidade do moderador causou um aumento na taxa de absorção de nêutron, conforme as funções 6.20 e 6.21 abaixo.

$$\sum_{a}^{R} (y) = 0,010284 + 0,00015y - 0,0003y^{2} + 0,0002y^{3}$$
 (6.20)

$$\sum_{a}^{T} (y) = 0,096645 + 0,004483y - 0,005934y^{2} + 0,002779y^{3}$$
 (6.21)

Isto se explica pelo fator de haver uma maior concentração do moderador, o que aumenta a absorção e a seção de choque de captura, conforme as funções 6.22 e 6.23 abaixo,

$$\Sigma_c^R(y) = 0,0079 + 0,0001y - 0,0002y^2 + 0,0002y^3$$
 (6.22)

$$\sum_{c}^{T}(y) = 0.05325 + 0.002933y - 0.003467y^{2} + 0.001445y^{3}$$
 (6.23)

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 6.24 e 6.25:

$$v \sum_{f}^{R} (y) = 0,006198 + 0,00005y - 0,0002y^{2} + 0,0002y^{3}$$
(6.24)

$$\nu \sum_{f}^{T} (y) = 0.105648 + 0.003912y - 0.005867y^{2} + 0.0032y^{3}$$
 (6.25)

Observa-se que as seções de choque de espalhamento aumentam com a elevação da temperatura do moderador conforme as funções 6.26 e 6.27 abaixo.

$$\sum_{s}^{R} (y) = 0.625226 + 0.079983y - 0.071366y^{2} + 0.007867y^{3}$$
 (6.26)

$$\sum_{s}^{T} (y) = 1,454249 + 0,273184y - 0,232533y^{2} + 0,014666y^{3}$$
(6.27)

Isto ocorre devido o aumento do valor da densidade do moderador, aumentar a concentração do mesmo e por consequência aumenta a taxa das reações de espalhamento.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$0,002384 + 0,000050y - 0,000100y^2$
	Térmico	$0,043358 + 0,001450y - 0,002400y^2 + 0,001467y^3$
Total	Rápido	$0,635333 + 0,079950y - 0,071500y^2 + 0,008200y^3$
	Térmico	$1,550885 + 0,278451y - 0,238852y^2 + 0,016549y^3$
Fspalhamento	Rápido	$0,625226 + 0,079983y - 0,071366y^2 + 0,007867y^3$
Lspaniamento	Térmico	$1,454249 + 0,273184y - 0,232533y^2 + 0,014666y^3$
Absorção	Rápido	$0,010284 + 0,000150y - 0,000300y^2 + 0,000200y^3$
nosoição	Térmico	$0,096645 + 0,004483y - 0,005934y^2 + 0,002779y^3$
Captura	Rápido	$0,007900 + 0,000100y - 0,000200y^2 + 0,000200y^3$
Cupturu	Térmico	$0,053250 + 0,002933y - 0,003467y^2 + 0,001445y^3$
Nu-Fissão	Rápido	$0,006198 + 0,000050y - 0,000200y^2 + 0,000200y^3$
	Térmico	$0,105648 + 0,003912y - 0,005867y^2 + 0,003200y^3$
Transporte	Rápido	$0,247625 + 0,019200y - 0,017000y^2 + 0,001800y^3$
	Térmico	$0,911020 + 0,155166y - 0,130644y^2 + 0,006800y^3$
Espalhamento 1-1		$0,600650 + 0,074700y - 0,066900y^2 + 0,007800y^3$
Espalhamento 1-2		$0,024475 + 0,005000y - 0,004400y^2 + 0,000400y^3$
Espalhamento 2-2		$1,454249 + 0,273184y - 0,232533y^2 + 0,014666y^3$

Tabela 6.5 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (d_M)











Figura 6.38 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 6.39 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 6.40 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico









Figura 6.46 – Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico



Figura 6.48 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da densidade do moderador, foram reescritas na tabela 6.6, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$4,085x10^{-4} + 4,615x10^{-3}D_M - 2,687x10^{-3}D_M^2$
	Térmico	$-1,139x10^{-1} + 5,148x10^{-1}D_M - 5,614x10^{-1}D_M^2 + 2,044x10^{-1}D_M^3$
Total	Rápido	$-1,571 + 5,781xD_M - 4,699xD_M^2 + 1,142xD_M^3$
	Térmico	$-5,064 + 1,639x10^{1}D_{M} - 1,202x10^{1}D_{M}^{2} + 2,305xD_{M}^{3}$
Espalhamento	Rápido	$-1,554 + 5,683xD_M - 4,583xD_M^2 + 1,096xD_M^3$
Lispaniamento	Térmico	$-4,887 + 1,557x10^{1}D_{M} - 1,122x10^{1}D_{M}^{2} + 2,043xD_{M}^{3}$
Absorção	Rápido	$-1,048x10^{-2} + 6,876x10^{-2}D_M - 7,581x10^{-2}D_M^{-2} + 2,786x10^{-2}D_M^{-3}$
	Térmico	$-2,331x10^{-1} + 1,045xD_M - 1,101xD_M^2 + 3,871x10^{-1}D_M^3$
Contura	Rápido	$-1,089x10^{-2} + 6,414x10^{-2}D_M - 7,312x10^{-2}D_M^{-2} + 2,786x10^{-2}D_M^{-3}$
Cupturu	Térmico	$-1,275x10^{-1} + 5,630x10^{-1}D_M - 5,826x10^{-1}D_M^2 + 2,013x10^{-1}D_M^3$
Nu-Fissão	Rápido	$-1,238x10^{-2} + 6,388x10^{-2}D_{M} - 7,312x10^{-2}D_{M}^{-2} + 2,786x10^{-2}D_{M}^{-3}$
	Térmico	$-2,517x10^{-1} + 1,154xD_M - 1,242xD_M^2 + 4,458x10^{-1}D_M^3$
Transporte	Rápido	$-2,667x10^{-1} + 1,334xD_M - 1,067xD_M^2 + 2,507x10^{-1}D_M^{-3}$
	Térmico	$-2,552 + 8,363xD_M - 5,814xD_M^2 + 9,473x10^{-1}D_M^{-3}$
Espalhamento 1-1		$-1,473 + 5,443xD_M - 4,440xD_M^2 + 1,087xD_M^3$
Espalhamento 1-2		$-1,039x10^{-1} + 3,274x10^{-1}D_M - 2,537x10^{-1}D_M^2 + 5,572x10^{-2}D_M^3$
Espalhamento 2-2		$-4,887 + 1,557x10^{1}D_{M} - 1,122x10^{1}D_{M}^{2} + 2,043xD_{M}^{3}$

Tabela 6.6 – Seções de Choque em função da densidade do moderador (d_M)

6.5 – Parametrização com a Concentração de Boro

Analogamente ao descrito no item 5.5 do capitulo 5, observa-se que a presença das varetas absorvedoras de Gd_2O_3 – UO_2 aumenta a taxa de absorção. As expansões polinomiais apresentadas na tabela 6.7, descritas em função da concentração de boro, revelaram um aumento da taxa de absorção e por consequência uma diminuição do número de fissões, com a presença das varetas absorvedoras de Gd_2O_3 – UO_2 e com o aumento da concentração de boro solúvel. Como já descrito no capitulo 5 a elevada seção de choque para captura de nêutrons exibida pelo ${}^{10}_{5}B$ (isótopo que constitui 20% do boro natural) causa um aumento na absorção de nêutrons, e altera o fator de multiplicação k, ou seja diminue a taxa de fissão, conforme mostra as funções 6.28 e 6.29 abaixo.

$$\sum_{f}^{R} (y) = 0,002300 \tag{6.28}$$

$$\sum_{f}^{T} (y) = 0,039661 - 0,000017y + 0,000200y^{2} - 0,000400y^{3}$$
 (6.29)

Conforme já mencionado, observa-se o aumento na taxa de absorção, tanto para a faixa térmica quanto para a rápida, conforme as funções 6.30 e 6.31 abaixo.

$$\sum_{a}^{R} (y) = 0,009909 \tag{6.30}$$

$$\sum_{a}^{T} (y) = 0,089402 - 0,000116y - 0,000700y^{2} + 0,002133y^{3}$$
 (6.31)

Analogamente há um aumento da captura, conforme as funções 6.32 e 6.33 abaixo,

$$\sum_{c}^{R}(y) = 0,007600 \tag{6.32}$$

$$\sum_{c}^{T}(y) = 0,049668 - 0,000227y - 0,000810y^{2} + 0,002636y^{3}$$
(6.33)

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 6.34 e 6.35.

$$\nu \sum_{f}^{R} (y) = 0,005948 \tag{6.34}$$

$$\nu \sum_{f}^{T} (y) = 0,096670 + 0,000166y + 0,000400y^{2} - 0,001200y^{3}$$
 (6.35)

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002300
	Térmico	$0,039661 - 0,000017y + 0,000200y^2 - 0,000400y^3$
Total	Rápido	0,524158 + 0,000050y
	Térmico	$0,920108 - 2,367043y - 0,327679y^2 + 2,947615y^3$
Espalhamento	Rápido	0,514308
Espaniamento	Térmico	$1,084939 + 0,000102y + 0,001552y^2 - 0,004385y^3$
Absorção	Rápido	0,009909
	Térmico	$0,089402 - 0,000116y - 0,000700y^2 + 0,002133y^3$
Captura	Rápido	0,007600
Cupturu	Térmico	$0,049668 - 0,000227y - 0,000810y^2 + 0,002636y^3$
Nu-Fissão	Rápido	0,005948
	Térmico	$0,096670 + 0,000166y + 0,000400y^2 - 0,001200y^3$
Transporte	Rápido	0,221166
	Térmico	$0,703165 + 0,000161y + 0,000866y^2 - 0,002466y^3$
Espalhamento 1-1		0,496700
Espalhamento 1-2		0,017625
Espalhamento 2-2		$1,084939 - 0,000102y + 0,001552y^2 - 0,004385y^3$

Tabela 6.7 – Seções de Choque em função da concentração de $B^{10}(C_{b}\,)$



Figura 6.49 - Seção de choque de fissão do grupo rápido







Figura 6.53 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido



Figura 6.54 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 6.55 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 6.56 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico





Figura 6.60 - Seção de choque de captura do grupo térmico





Figura 6.63 – Seção de choque de transporte do grupo rápido



Figura 6.64 - Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da concentração de boro, foram reescritas na tabela 6.8, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$2,300x10^{-3}$
	Térmico	$4,210x10^{-2} - 1,071x10^{-5}C_b + 1,565x10^{-8}C_b^2 - 7,588x10^{-12}C_b^3$
Total	Rápido	$5,241x10^{-1} + 1,334x10^{-7}C_b$
Total	Térmico	$-9,692 + 6,211x10^{-2}C_b - 1,072x10^{-4}C_b^2 + 5,592x10^{-8}C_b^3$
Espalhamento	Rápido	5,143x10 ⁻¹
Lspaniamento	Térmico	$1,109 - 1,110x10^{-4}C_b + 1,670x10^{-7}C_b^2 - 8,318x10^{-11}C_b^3$
Absorção	Rápido	9,909x10 ⁻³
	Térmico	$7,778x10^{-2} + 5,332x10^{-5}C_b - 8,084x10^{-8}C_b^{-2} + 4,046x10^{-11}C_b^{-3}$
Captura	Rápido	7,600x10 ⁻³
Captura	Térmico	$3,559x10^{-2} + 6,518x10^{-5}C_b - 9,951x10^{-8}C_b^2 + 5,001x10^{-11}C_b^3$
Nu-Fissão	Rápido	5,948x10 ⁻³
	Térmico	$1,031x10^{-1} - 2,978x10^{-5}C_b + 4,552x10^{-8}C_b^2 - 2,276x10^{-11}C_b^3$
Transporte	Rápido	2,212x10 ⁻¹
	Térmico	$7,167x10^{-1} - 6,208x10^{-5}C_b + 9,386x10^{-8}C_b^2 - 4,678x10^{-11}C_b^{-3}$
Espalhamento 1-1		4,967 <i>x</i> 10 ⁻¹
Espalhamento 1-2		$1,763x10^{-2}$
Espalhamento 2-2		$1,109 - 1,110x10^{-4}C_b + 1,670x10^{-7}C_b^{-2} - 8,318x10^{-11}C_b^{-3}$

Tabela 6.8 – Seções de Choque em função da concentração de $B^{10}\left(C_{b}\right.$

6.6 - Parametrização com o Enriquecimento

As expansões apresentadas na tabela 6.9, descritas em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U$ revelaram um aumento do número de fissões com o aumento do enriquecimento, mesmo com a presença das varetas absorvedoras, tanto para o grupo rápido quanto para o grupo térmico, confirmando que as equações estão coerentes com a teoria.

$$\sum_{f}^{R}(y) = 0,0025 + 0,0006y \tag{6.36}$$

$$\sum_{f}^{T} (y) = 0.044402 + 0.013583y - 0.0015y^{2} + 0.0002y^{3}$$
(6.37)

Observa-se que o aumento do enriquecimento causou um aumento na taxa de absorção, tanto para a faixa térmica quanto para a rápida, conforme as funções 6.38 e 6.39 abaixo.

$$\sum_{a}^{R} (y) = 0.010175 + 0.0008y \tag{6.38}$$

$$\sum_{a}^{T} (y) = 0.094190 + 0.014198y - 0.0015y^{2} + 0.0002y^{3}$$
 (6.39)

Analogamente há um aumento da captura, conforme as funções 6.40 e 6.41 abaixo.

$$\sum_{c}^{R} (y) = 0,007650 + 0,000150y \tag{6.40}$$

$$\sum_{c}^{T} (y) = 0,049726 + 0,000622y + 0,000253y^{2} - 0,000141y^{3}$$
 (6.41)

As seções de choque nu-fissão variaram de forma análoga as seções de choque de fissão, conforme se observa nas funções 6.42 e 6.43.

$$v \sum_{f}^{R} (y) = 0,006475 + 0,001550y - 0,0001y^{2}$$
(6.42)

$$v \sum_{f}^{T} (y) = 0.108130 + 0.003016y - 0.0036y^{2} + 0.0006y^{3}$$
 (6.43)

Observa-se que as seções de choque de espalhamento diminuiram com o aumento do enriquecimento, conforme as funções 6.44 e 6.45 abaixo.

$$\sum_{s}^{R}(y) = 0,513775 - 0,0016y \tag{6.44}$$

$$\sum_{s}^{T}(y) = 1,078323 - 0,019608y + 0,004022y^{2} - 0,000073y^{3}$$
(6.45)

Isto ocorre devido ao aumento da taxa de absorção causado pela presença das varetas $deGd_2O_3 - UO_2$ a qual diminue a taxa das reações de espalhamento.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002500 + 0,000600y
	Térmico	$0,044402 + 0,013583y - 0,001500y^2 + 0,000200y^3$
Total	Rápido	0,523859 -0,000850y
	Térmico	1,357427 - 0,661176y - 0,213919y ² - 0,658393y ³
Espalhamento	Rápido	0,513775 - 0,001600y
Lspananento	Térmico	$1,078323 - 0,019608y + 0,004022y^2 - 0,000073y^3$
Absorção	Rápido	0,010175 + 0,000800y
	Térmico	$0,094190 + 0,014198y - 0,001500y^2 + 0,000200y^3$
Captura	Rápido	0,007650 + 0,000150y
Cupturu	Térmico	$0,049726 + 0,000622y + 0,000253y^2 - 0,000141y^3$
Nu-Fissão	Rápido	$0,006475 + 0,001550y - 0,000100y^2$
	Térmico	$0,108130 + 0,033016y - 0,003600y^2 + 0,000600y^3$
Transporte	Rápido	0,221000 - 0,000500y
	Térmico	$0,698669 - 0,012668y + 0,003466y^2 - 0,000600y^3$
Espalhamento 1-1		0,496350 - 0,001050y
Espalhamento 1-2		0,017425 - 0,000600y
Espalhamento 2-2		$1,078323 - 0,019608y + 0,004022y^2 - 0,000073y^3$

Tabela 6.9 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U$ (E)







Figura 6.66 - Seção de choque de fissão do grupo térmico



Figura 6.68 - Seção de choque total do grupo térmico



Enriquecimento (% de U²³⁵)

Figura 6.70 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 6.71 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 6.72 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico



Figura 6.74 - Seção de choque de absorção do grupo térmico



Figura 6.76 – Seção de choque de captura do grupo térmico







Figura 6.78 - Seção de choque de nu-fissão do grupo térmico



Figura 6.79 – Seção de choque de transporte do grupo rápido



Figura 6.80 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função do enriquecimento, foram reescritas na tabela 6.10, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	$1,100x10^{-3} + 4,000x10^{-4}E$
	Térmico	$2,002x10^{-3} + 1,590x10^{-2}E - 1,289x10^{-3}E^{2} + 5,927x10^{-5}E^{3}$
Total	Rápido	$5,258x10^{-1} - 5,667x10^{-4}E$
	Térmico	$1,010x10^{1} - 6,945xE + 1,953xE^{2} - 1,951x10^{-1}E^{3}$
Espalhamento	Rápido	$5,175x10^{-1}-1,067x10^{-3}E$
Espanamento	Térmico	$1,147 - 2,638x10^{-2}E + 2,015x10^{-3}E^{2} - 2,163x10^{-5}E^{3}$
Absorção	Rápido	$8,308x10^{-3} + 5,334x10^{-4}E$
	Térmico	$5,035x10^{-2} + 1,631x10^{-2}E - 1,289x10^{-3}E^{2} + 5,927x10^{-5}E^{3}$
Captura	Rápido	$7,300x10^{-3} + 1,000x10^{-4}E$
Cupturu	Térmico	$5,144x10^{-2} - 1,908x10^{-3}E + 5,512x10^{-4}E^2 - 4,178x10^{-5}E^3$
Nu-Fissão	Rápido	$2,314x10^{-3} + 1,345x10^{-3}E - 4,445x10^{-5}E^{2}$
110-115540	Térmico	$3,872x10^{-3} + 3,975x10^{-2}E - 3,467x10^{-3}E^{2} + 1,778x10^{-4}E^{3}$
Transporte	Rápido	$2,222x10^{-1} - 3,334x10^{-4}E$
	Térmico	$7,547x10^{-1} - 2,576x10^{-2}E + 3,407x10^{-3}E^2 - 1,778x10^{-4}E^3$
Espalhamento 1-1		$4,988x10^{-1} - 7,000x10^{-4}E$
Espalhamento 1-2		$1,882x10^{-2} - 4,000x10^{-4}E$
Espalhamento 2-2		$1,147 - 2,638x10^{-2}E + 2,015x10^{-3}E^{2} - 2,163x10^{-5}E^{3}$

Tabela 6.10 – Seções de Choque em função do enriquecimento de $^{235}_{92}U$ (E)

6.7 – Parametrização em função da Temperatura e Correspondente Densidade do Moderador

Nesta análise as funções de seção de choque são escritas na tabela 6.11 em função da temperatura do moderador associada ao valor da densidade relativa a essa temperatura mantendo-se os demais parâmetros com os valores de referencia descritos na tabela 2.2

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Fissão	Rápido	0,002334 - 0,00005y
	Térmico	$0,043789 - 0,005373y + 0,001566y^2 - 0,001267y^3$
Total	Rápido	$0,607341 - 0,062700y - 0,043600y^2 - 0,025400y^3$
	Térmico	$1,481902 - 0,267374y - 0,122656y^2 - 0,0786666y^3$
Espalhamento	Rápido	$0,597175 - 0,062550y - 0,043400y^2 - 0,025200y^3$
Espamamento	Térmico	$1,383214 - 0,256788y - 0,119726y^2 - 0,076000y^3$
Absorção	Rápido	$0,010209 - 0,000150y - 0,000200y^2 - 0,000200y^3$
nosorçuo	Térmico	$0,098839 - 0,010456y - 0,003400y^2 - 0,002534y^3$
Captura	Rápido	$0,007875 - 0,000100y - 0,000200y^2 - 0,000200y^3$
Cupturu	Térmico	$0,053534 - 0,004834y - 0,001934y^2 - 0,001600y^3$
Nu-Fissão	Rápido	$0,006123 - 0,000200y - 0,000100y^2$
	Térmico	$0,110012 - 0,013212y - 0,002700y^2 - 0,002800y^3$
Transporte	Rápido	$0,240941 - 0,014950y - 0,010300y^2 - 0,006000y^3$
	Térmico	$0,865102 - 0,134961y - 0,071066y^2 - 0,041600y^3$
Espalhamento 1-1		$0,574425 - 0,058600y - 0,040700y^2 - 0,023800y^3$
Espalhamento 1-2		$0,022700 - 0,003800y - 0,002600y^2 - 0,001600y^3$
Espalhamento 2-2		$1,383214 - 0,259188y - 0,119726y^2 - 0,076000y^3$

Tabela 6.11 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do moderador










Figura 6.85 - Seção de choque de espalhamento do grupo rápido



Figura 6.86 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo rápido



Figura 6.87 – Seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico



Figura 6.88 – Seção de choque de espalhamento do grupo térmico para o grupo térmico







Figura 6.93 - Seção de choque de nu-fissão do grupo rápido



166





Figura 6.96 – Seção de choque de transporte do grupo térmico

Para uma visualização mais simples do comportamento da seção de choque em função da densidade e da temperatura do moderador, foram reescritas na tabela 6.12, as funções parametrizadas de seções de choque, sem a utilização do argumento y.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial
Elasão	Rápido	$2,480x10^{-3} - 3,195x10^{-7}T_M$
FISSão	Térmico	$1,042x10^{-1} - 2,994x10^{-4}T_M + 5,167x10^{-7}T_M^2 - 3,306x10^{-10}T_M^3$
Total	Rápido	$1,050 - 2,918x10^{-3}T_M + 7,295x10^{-6}T_M^2 - 6,627x10^{-9}T_M^3$
Total	Térmico	$3,171 - 9,967x10^{-3}T_M + 2,310x10^{-5}T_M^2 - 2,053x10^{-8}T_M^3$
Espalhamanto	Rápido	$1,036 - 2,892x10^{-3}T_M + 7,232x10^{-6}T_M^2 - 6,575x10^{-9}T_M^3$
Espainamento	Térmico	$3,000 - 9,574x10^{-3}T_M + 2,227x10^{-5}T_M^2 - 1,983x10^{-8}T_M^3$
Absorção	Rápido	$1,391x10^{-2} - 2,612x10^{-5}T_M + 6,330x10^{-8}T_M^2 - 5,218x10^{-11}T_M^3$
riosorçuo	Térmico	$1,633x10^{-1} - 3,534x10^{-4}T_M + 7,666x10^{-7}T_M^2 - 6,612x10^{-10}T_M^3$
Captura	Rápido	$1,143x10^{-2} - 2,580x10^{-5}T_M + 6,330x10^{-8}T_M^2 - 5,218x10^{-11}T_M^3$
Cupturu	Térmico	$9,089x10^{-2} - 2,198x10^{-4}T_M + 4,927x10^{-7}T_M^2 - 4,175x10^{-10}T_M^3$
Nu-Fissão	Rápido	$5,856x10^{-3} + 2,450x10^{-6}T_M - 4,083x10^{-9}T_M^{-2}$
	Térmico	$1,951x10^{-1} - 4,405x10^{-4}T_M + 8,902x10^{-7}T_M^2 - 7,306x10^{-10}T_M^3$
Transporte	Rápido	$3,458x10^{-1} - 6,902x10^{-4}T_M + 1,723x10^{-6}T_M^2 - 1,566x10^{-9}T_M^3$
Tunsporte	Térmico	$1,687 - 4,998 x 10^{-3} T_M + 1,196 x 10^{-5} T_M^2 - 1,085 x 10^{-8} T_M^3$
Espalhamento 1-1		$9,897x10^{-1} - 2,739x10^{-3}T_M + 6,842x10^{-6}T_M^2 - 6,210x10^{-9}T_M^3$
Espalhamento 1-2		$5,137x10^{-2} - 1,883x10^{-4}T_M + 4,655x10^{-7}T_M^2 - 4,175x10^{-10}T_M^3$
Espalhamento 2-2		$3,000 - 9,574x10^{-3}T_M + 2,227x10^{-5}T_M^2 - 1,983x10^{-8}T_M^3$

Tabela 6.12 – Seções de Choque em função da densidade e da temperatura do moderador

6.8 – Comparação entre os resultados dos cálculos para o elemento combustível com *e sem veneno queimável*

Comparando os resultados das análises com e sem a presença de varetas de Gd₂O₃-UO₂,

Teve-se como principais observações:

- Redução considerável do fator de multiplicação infinito nas análises em função de todos os parâmetros;
- No comportamento das seções de choque das análises com e sem veneno queimável, observamos que a presença das varetas absorvedoras reduz a quantidade de nêutrons fazendo com que reduza o número de fissões em relação ao caso sem veneno queimável para todos os casos;
- a taxa de absorção aumentou consideravelmente com a presença das varetas de Gd₂O₃ –UO₂ em relação ao caso sem veneno queimável.

CAPÍTULO 7

OUTROS RESULTADOS

7.1 – Introdução

Neste capítulo são apresentados testes de comparação de resultados provenientes da expansão polinomial e provenientes do cálculo direto, e são também apresentados testes de comparação de resultados pela análise de parâmetros de projeto, tais como o coeficiente de reatividade de temperatura e do fator de fissão rápida. Outros testes, tais como, a comparação por meio da análise do k-inf calculado pelas expansões polinomiais em comparação com o obtido com o código MCNP [22], também são descritos.

7.2 – Comparação Expansão X Cálculo Direto

Foram comparados os resultados obtidos de uma interpolação direta com as expansões polinomiais com os valores obtidos diretamente do código nuclear SCALE, pela escolha de pontos dentro de intervalo de temperaturas do combustível e do moderador (descrito no capítulo 2).

Inicialmente fez-se uma comparação de resultados da análise do elemento combustível com varetas combustíveis de Gd_2O_3 , utilizando a temperatura de combustível de 1248 K, mantendo-se os demais parâmetros com os valores de referência. Em seguida interpolou-se esse valor nas expansões polinomiais das seções de choque determinadas. Utilizou-o também como dado de entrada no SCALE para que após o seu processamento computacional se obtivesse os mesmos tipos de seções de choque e assim, mediante os dois resultados, fosse feita uma comparação.

Os resultados foram descritos na tabela 7.1, onde se apresenta o desvio entre os dois resultados.

Tabela 7.1 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Tchebychev em função da temperatura do combustível de 1248 K em um elemento combustível com veneno queimável.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial	Interpolação	SCALE	Desvio
Fissão	1	0,002300	0,002300	0,002302	0,0087%
1 15540	2	$0,039943 - 0,000100y + 0,000100y^2 - 0,000001y^3$	0,039918	0,039869	0,1229%
Total	1	0,524183 + 0,000450y	0,524408	0,524373	0,0067%
Total	2	$1,175779 - 0,001695y - 0,000778y^2 + 0,001209y^3$	1,174888	1,175940	0,0894%
Fsnalh	1	0,514269 + 0,000117y	0,514327	0,514370	0,0084%
Lspan	2	$1,087917 - 0,000023y + 0,000166y^2 + 0,000097y^3$	1,087959	1,088030	0,0065%
Absoraão	1	0,009900 + 0,000250y	0,010025	0,010051	0,2587%
10301ç40	2	$0,087966 - 0,000252y + 0,000052y^2 + 0,000052y^3$	0,087859	0,087908	0,0557%
Cantura	1	$0,007564 + 0,000180y + 0,000067y^2 + 0,000185y^3$	0,007694	0,007749	0,7098%
Captura	2	0,048050 - 0,000050y	0,048025	0,048039	0,0291%
Nu-Fissão	1	0,005948	0,005948	0,005937	0,1853%
140 1 15500	2	0,097376 - 0,000400y	0,097176	0,097148	0,0288%
Transporte	1	0,221116 - 0,000100y	0,221066	0,221106	0,0181%
	2	0,704667 - 0,000038y - 0,000200y ³	0,704623	0,704536	0,0123%
Espalh 1-1		$0,496775 + 0,000400y - 0,000100y^2$	0,496950	0.496874	0,0153%
Espalh 1-2		0,017625 - 0,000200y	0,017525	0,017496	0,1657%
Espalh 2-2		$1,087917 - 0,000023y + 0,000166y^2 + 0,000097y^3$	1,087959	1,088030	0,0065%

Na tabela 7.1 grupo 1 significa grupo rápido e grupo 2 significa grupo térmico. Nesta análise os resultados de valores de seção de choque, de ambas as fontes, apresentaram excelente concordância, onde se obteve erros relativos de valores de seção de choque entre os métodos menores que 0,71%, demonstrando a efetividade do método de parametrização.

Repetiu-se a mesma análise descrita acima, utilizando um elemento combustível sem veneno queimável. Os resultados são apresentados na tabela 7.2 abaixo. Nesta tabela, grupo 1 significa grupo rápido e grupo 2 significa grupo térmico.

Tabela 7.2 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Tchebychev em função da temperatura do combustível de 1248 K em um elemento combustível sem veneno queimável.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial	Interpolação	SCALE	Desvio
Fissão	1	0,002284	0,002284	0,002280	0,1754%
1 15540	2	0,042208 – 0,000200y	0,042108	0,042129	0,0498%
Total	1	0,526833 + 0,000350y	0,527008	0,527014	0,0011%
Total	2	$1,237235 - 0,000616y - 0,000100y^3$	1,236915	1,236870	0,0036%
Espalh	1	0,517950 + 0,000050y	0,517975	0,517999	0,0047%
Lopani	2	$1,170474 - 0,000300y - 0,000167y^2 + 0,000133y^3$	1,170299	1,170310	0,0009%
Absorção	1	0,008934 + 0,000250y	0,009059	0,009056	0,0387%
110501çu0	2	0,066689 – 0,000250y	0,066564	0,066565	0,0015%
Captura	1	0,006725 + 0,000250y	0,006850	0,006850	0,0074%
Cupturu	2	0,024481 - 0,000050y	0,024456	0,0244362	0,0810%
Nu-Fissão	1	0,005698	0,005698	0,00568001	0,3167%
144 1 15540	2	$0,102851 - 0,000467y + 0,000100y^2$	0,102553	0,102655	0,0994%
Transporte	1	$0,214008+0,000216y+0,000049y^2-0,000333y^3$	0,214087	0,214016	0,0332%
Tunsporte	2	0,748014 – 0,000450y	0,747789	0,7478008	0,0016%
Espalh 1-1		0,498700 + 0,000300y	0,498850	0,498854	0,0008%
Espalh 1-2		0,019250 – 0,000200y	0,019150	0,0191451	0,0256%
Espalh 2-2		$1,170474 - 0,000300y - 0,000166y^2 + 0,000133y^3$	1,170299	1,170310	0,0009%

Fez-se uma terceira análise, utilizando também um elemento combustível sem veneno queimável, por meio de uma comparação de resultados pela escolha de um ponto dentro do intervalo de temperaturas do moderador, descrito no capítulo 2. Foram obtidos valores de seções de choque, de uma interpolação direta com as expansões polinomiais, os quais foram comparados com os valores de seção de choque obtidos diretamente pelo código nuclear SCALE. Como exemplo, escolheu-se a temperatura de 456,5 K, e a interpolou nas expansões polinomiais das seções de choque determinadas. Esta temperatura também foi utilizada como dado de entrada no SCALE para que após o seu processamento computacional se obtivesse os mesmos tipos de seções de choque e assim, mediante os dois resultados, fosse feita uma comparação.

Tabela 7.3 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Tchebychev em
função da temperatura do moderador de 456,5 K em um elemento combustível sem
veneno queimável.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial	Interpolação	SCALE	Desvio
Fissão	1	0,002283	0,00228	0,00228	0,0040%
1 10540	2	$0,041712 - 0,001728y + 0,002833y^2 - 0,001600y^3$	0,04171	0,04158	0,3199%
Total	1	0,526783 + 0,000050y	0,52678	0,52576	0,1940%
Total	2	$1,235810 - 0,009665y + 0,034174y^2 - 0,030978y^3$	1,23581	1,26356	0,6000%
Fsnalh	1	0,517925 + 0,000050y	0,51793	0,51788	0,0001%
Lopum	2	$1,182258 - 0,007476y + 0,006424y^2 - 0,029370y^3$	1,18226	1,18321	0,0803%
Absorção	1	0,0089084	0,00891	0,00892	0,1121%
110501çu0	2	$0,066396 - 0,002528y + 0,004400y^2 - 0,002733y^3$	0,06640	0,07034	0,3940%
Cantura	1	0,006725	0,00673	0,00670	0,4478%
Cupturu	2	$0,024333 - 0,000767y + 0,001667y^2 - 0,001400y^3$	0,02433	0,02442	0,3685%
Nu-Fissão	1	0,005697	0,00570	0,00569	0,1757%
140 1 15500	2	$0,102300 - 0,004022y + 0,007022y^2 - 0,004133y^3$	0,10230	0,10302	0,6989%
Transporte	1	0,214028	0,21403	0,21404	0,0047%
Transporte	2	$0,747524 - 0,006243y + 0,010774^2 - 0,006711y^3$	0,74752	0,75715	0,0127%
Espalh 1-1		0,49865 + 0,00005y	0,49865	0.49863	0,0034%
Espalh 1-2		0,019250	0,01925	0,01925	0,0067%
Espalh 2-2		$1,182258 - 0,007476y + 0,006424y^2 - 0,029370y^3$	1,18226	1,18321	0,0803%

Na tabela 7.3 grupo 1 significa grupo rápido e grupo 2 significa grupo térmico. Nesta análise os resultados de valores de seção de choque, de ambas as fontes, apresentaram excelente concordância, onde se obteve desvios de valores de seção de choque entre os métodos menores que 0,70%, demonstrando a efetividade do método de parametrização apresentado.

7.3 – Cálculo do Coeficiente de Reatividade de Temperatura

Neste cálculo, o coeficiente de reatividade de temperatura (α_T) e o fator de fissão rápida, parâmetros de projeto, foram utilizados como base de comparação entre as expansões polinomiais e o sistema SCALE. Em um projeto de um reator, os balanços de reatividade são utilizados na operação de criticalização para avaliar os desvios existentes entre os valores das reatividades previstas, quando o projeto foi calculado, e os valores reais das reatividades.

O coeficiente de reatividade de temperatura é escrito de acordo com a seguinte expressão:

$$\alpha_{T} = \frac{\rho(T_{2}) - \rho(T_{1})}{T_{2} - T_{1}}$$
(7.1)

onde (α_T) significa o coeficiente de reatividade de temperatura, $\rho(T)$ expressa a reatividade na temperatura T e *T* a temperatura do combustível e/ou do moderador.

Pela comparação entre os coeficientes de reatividade de temperatura, obtidos pelo SCALE, em comparação com o obtido pelas expansões polinomiais, apresentados na tabela 7.4, pode-se constatar a proximidade dos resultados [22].

Sabe-se que o coeficiente de reatividade de temperatura é utilizado para medir a variação sofrida pela reatividade ($\Delta \rho$) devido a uma variação da temperatura no meio analisado. Ele é definido pela reatividade indicando quanto o reator está afastado de sua condição de criticalidade (k-inf = 1). Escreve-se essa reatividade de acordo com a seguinte expressão:

$$\rho(T) = \frac{k_{\inf}(T) - 1}{k_{\inf}(T)}$$
(7.2)

onde $\rho(T)$ significa a reatividade na temperatura T e $k_{inf}(T)$ expressa o fator de multiplicação infinito na temperatura T e T a temperatura do combustível e/ ou moderador.

Em um reator nuclear sabemos que o aumento da temperatura afeta o valor da reatividade por duas razões:

 A energia média dos nêutrons térmicos aumenta e portanto a absorção dos mesmos será prejudicada porque a seção de choque varia com a energia; • O livre caminho médio e a probabilidade de não fuga são funções da densidade, a qual muda com a temperatura.

A operação de um reator requer um coeficiente de reatividade de temperatura bem pequeno, tal que um estado estacionário possa ser mantido por meio de barras de controle. Neste estado, o reator se mantém estável, apesar da flutuação da temperatura do moderador. Se o coeficiente de temperatura for negativo, isto é, se a reatividade decresce com o aumento da temperatura, o reator ficará estável. Já se o coeficiente de reatividade de temperatura for positivo, resultará numa instabilidade, uma vez que o reator crítico se torna supercrítico com o aumento da temperatura.

Para um reator térmico, o coeficiente de reatividade de temperatura pode ser convenientemente separado em duas partes, a saber:

- *Coeficiente de Temperatura Nuclear*, o qual é determinado pelo efeito da seção de choque;
- *Coeficiente de Densidade de Temperatura*, devido a mudanças no volume e na densidade do sistema.

7.3.1- Comparação com o código SCALE

Neste teste, determinou-se o coeficiente de reatividade de temperatura (α_T), por meio do valor do k-inf, calculado pelas seções de choque, as quais foram obtidas das expansões polinomiais, para um determinado ponto de temperatura. E comparou-se este valor ao valor do coeficiente de reatividade de temperatura (α_T), obtido por meio do valor do k-inf, calculado pelo código SCALE, com as mesmas condições de contorno.

Aplicou-se o método de calculo desenvolvido neste trabalho para uma condição de contorno, possuindo como objeto de análise um elemento combustível do tipo PWR, com varetas absorvedoras de UO₂-Gd₂O₃. Foram considerados também valores idênticos para as temperaturas do combustível e do moderador.

Após a determinação das funções de seção de choques parametrizadas (expansão polinomial), escreveram-se os valores das mesmas para o ponto de temperatura de 590 K e calculou-se valor do k_{inf} na temperatura T, segundo a seguinte expressão:

$$k_{\inf}(T) = \frac{\nu_1 \sum_{f_1}(T)}{\sum_{R_1}(T)} + \frac{\nu_2 \sum_{f_2}(T)}{\sum_{R_2}(T)} \cdot \frac{\sum_{S_{12}}(T)}{\sum_{R_1}(T)}$$
(7.3)

onde $\sum_{f} (T)$ significa a seção de choque macroscópica de fissão, $\sum_{R} (T)$ expressão a seção de choque macroscópica de remoção e $\sum_{s} (T)$ significa a seção de choque macroscópica de espalhamento. Nesta expressão, sabe-se que a seção de choque macroscópica de remoção caracteriza a probabilidade que um nêutron será removido do grupo g por uma colisão. Ela é definida como:

$$\sum_{R_g} (T) = \sum_{t_g} (T) - \sum_{S_{gg}} (T)$$
(7.4)

onde $\sum_{t_g} (T)$ é a seção de choque total para o grupo g e $\sum_{s_{gg}} (T)$ é a seção de choque de espalhamento a qual caracteriza a probabilidade de que o nêutron pode sofrer reação de espalhamento e continuar no mesmo grupo devido a perder pouca energia.

O resultado obtido foi em seguida comparado com o valor do k_{inf} calculado pelo código SCALE, no mesmo intervalo de análise, conforme tabela 7.4. Foram utilizadas as temperaturas de 590 K e 600 K, para condição de contorno, sendo o mesmo valor de temperatura para o moderador e para o combustível, comforme tabela 7.4.

7.3.1.1-Resultados das Funções de Seção de Choque Parametrizadas

Na tabela 7.4 são apresentadas as funções de seção de choque parametrizada (expansões polinomiais) determinadas no processo, e os resultados provenientes da interpolação dos valores de temperatura nestas expansões polinomiais. Estas funções de seção de choque parametrizada refere-se ao elemento combustível estudado com veneno queimável.

Seção de choque	Grupo	Polinômio de Tchebychev	Y=590 K	Y=600 K
Fissão	Rápido	0,002300	0,002300	0,002300
1 15540	Térmico	$0,039634 - 0,000350y + 0,000200y^2$	0,039586	0,039536
Absorção	Rápido	0,009633	0,009633	0,009633
	Térmico	$0,087534 - 0,000500y + 0,000200y^2$	0,087464	0,087384
Nu-Fissão	Rápido	0,005948	0,005948	0,005948
	Térmico	$0,096603-0,000917y+0,000400y^2+0,000200y^3$	0,096749	0,096349
Fluxo	Rápido	0,318553 - 0.000050y	0,318560	0,318535
	Térmico	$0,064793 + 0,000333y - 0,000200y^2$	0,064714	0,064910
Espalhamento 1-2		0,017825	0,017825	0,017825

Tabela 7.4 – Resultados das Funções de Seção de Choque PWR com UO₂-Gd₂O₃

7.3.1.2 Resultados Provenientes do código SCALE

A tabela 7.5 apresenta os valores de seção de choques determinadas por meio do código SCALE, considerando o mesmo elemento de análise do item 7.3.1.1, e considerando a temperatura do combustível igual a temperatura do moderador nos pontos em que ambas são 590 K e 600 K.

Seção de choque	Grupo	$T_1 = 590 K$	$T_2 = 600 K$
Absorção	Rápido	0,009633	0,009662
110501300	Térmico	0,087464	0,087568
Nu-Fissão	Rápido	0,005948	0,005948
1.00110000	Térmico	0,096475	0,096725
Fluxo	Rápido	0,318545	0,318570
	Térmico	0,064889	0,064733
Espalhamento 1-2		0,017797	0,017794

Tabela 7.5 - Resultados de Seções de Choque obtidas pelo SCALE

7.3.1.3 Comparação de Resultados

As tabelas 7.6 apresentam a comparação dos k-inf, nos pontos das temperaturas $T_2 = 600$ K e $T_1 = 590$ K, por meio de ambos os métodos, ou seja, fornecido pelo SCALE e calculado pelas seções de choque oriundas da expansão polinomial. Os desvios obtidos mostram uma boa proximidade dos valores obtidos pelas expansões polinomiais, em relação aos cálculos feitos pelo SCALE, confirmando o quão preciso são os resultados oriundos das expansões polinomiais e validando assim o método.

Tabela 7.6 –	Comparação entre as o	expansões polino	miais e o SC	ALE pelo k-inf
1 40014 7.0	Comparação chuic do	mpunded pointo		

Resultados	$k_{ m inf}(T_2)$	$k_{ m inf}(T_1)$
SCALE	$0,93206701 \pm 0,00015$	$0,93409561 \pm 0,00029$
Expansão Polinomial	0,932384	0,9344781
Desvio	0,03401%	0,04094%

Na tabela 7.7 observamos valores de desvios pequenos na comparação dos resultados dos coeficientes de reatividade de temperatura devido à proximidade dos mesmos. Por

ser um parâmetro de projeto, os coeficientes de reatividade de temperatura representam uma boa base de comparação para esse tipo de analise.

Resultados	$\rho(T_2)$	$\rho(T_1)$	$\alpha_{_T}$
SCALE	-0,0728842 ∆k/k	-0,0701160 Δk/k	-0,0002768
Expansão Polinomial	-0,0725194 ∆k/k	-0,0705542 Δk/k	-0,0001965
Desvio	0,07075%	0,04380%	

Tabela 7.7 – Comparação entre as expansões polinomiais e o SCALE para $\rho(T)$

Representando os valores do coeficiente de reatividade de temperatura $\rho(T)$ da tabela 7.7 em PCM (partes por cem mil) temos:

- para o resultado (α_T = -0,0002768) proveniente do SCALE o valor de α_T = -27,68 PCM;
- para o resultado (α_T = -0,0001965) proveniente da expansão polinomial o valor de α_T = -19,65PCM;

7.4– Cálculo do Fator de Fissão Rápida

Defini-se o fator de fissão rápida como a razão entre o número total de nêutrons de fissão (de ambas as fissões rápida e térmica) e o número de nêutrons de fissão de nêutron térmico. O número de nêutrons que contribuem para a reação em cadeia, provenientes da fissão rápida do $\frac{^{238}}{_{92}}U$, é uma pequena fração dos nêutrons oriundos das fissões térmicas. Acima do limiar de fissão rápida, que é cerca de 1 Mev, há um certo equilíbrio entre a fissão, os "espalhamentos" elásticos e inelásticos, a captura e a fuga da barra para o moderador. A distribuição dos nêutrons que sofreram colisões seguintes pode ser expressa pelas seções de choque (em barns): $\sigma_T = \sigma_e + \sigma_i + \sigma_c + \sigma_f.$

A fissão rápida fornece $v_f = 2,51$ novos nêutrons, um pouco mais do que a fissão térmica. O fator de fissão rápida ϵ é usualmente muito próximo de 1 em um reator térmico com valores típicos do intervalo entre $\epsilon = 1,03$ e $\epsilon = 1,15$.

Na tabela 7.8 são escritos os resultados na qual os valores dos coeficientes de fissão rápida entre os métodos de cálculo apresentaram um desvio menor que 0,002%, aprovando o uso dessas equações nos cálculos de seção de choque.

Resultados	$\varepsilon(T_2)$	$\varepsilon(T_1)$
SCALE	1,0616532	1,0614939
Expansão polinomial	1,0616734	1,0614786
Desvio	0,0019%	0.0014%

Tabela 7.8 – Comparação entre as expansões polinomiais e o SCALE para o $\varepsilon(T)$

7.5 – Cálculo de k_{∞} (Expansão Polinomial X MCNP)

Neste teste, determinou-se o valor do k-inf, calculado pelo código MCNP [22], para a temperatura de 590 K e comparou-se esse resultado com o resultado obtido pela interpolação nas expansões polinomiais determinadas. Para esta análise foi utilizado à modelagem computacional no MCNP de um elemento combustível do tipo PWR, sem varetas absorvedoras de UO₂-Gd₂O₃, e com as especificações de um elemento combustível de ANGRA 2.

O cálculo do k_{inf} na temperatura T=590 K foi escrito por meio das expansões polinomiais, segundo a expressão 7.3 deste capítulo. Na tabela 7.9 são descritas as expansões polinomiais obtidas pelos cálculos com o MCNP, e os resultados da interpolação da temperatura de 590 K nas expansões polinomiais.

Seção de choque	Grupo	Polinômio de Tchebychev	Y=590 K
Absorção	Rápido	0,008684	0,008684
Absolçao	Térmico	0,066380 - 0,000550y	0,066463
Nu-Fissão	Rápido	0,005730	0,005730
144-1 15540	Térmico	$0,102537 - 0,000795y - 0,000166y^2 - 0,000200y^3$	0,102653
Espalhamento 1-2		0,019425	0,019425

Tabela 7.9 – Resultados das Funções de Seção de Choque PWR sem UO₂-Gd₂O₃

Na tabela 7.10 são descritos os valores do fator de multiplicação infinito obtidos pela modelagem as expansões polinomiais obtidas pelos cálculos com o MCNP, e os resultados da interpolação da temperatura de 590 K nas expansões polinomiais. A comparação do valor do k-inf obtido pelo código MCNP e pelas expansões

Tabela 7.10 - Resultados Teste

polinomiais para a temperatura de 590 K, apresentou um desvio de 0,1908%.

Método	$k_{ m inf}(T)$	Tempo de Processamento
SCALE	$1,\!2704170\pm0.00017$	20,46 min
MCNP	$1,\!2736100\pm0,\!00019$	69,77 min
Expansão polinomial	1,2711800	1 min
Desvio MCNP/Exp. polinomial	0,1908%	

7.6 – Comparação entre o método de parametrização por polinômios de Tchebychev e por polinômios de Lagrange

Os métodos de interpolação polinomial diferem, uns dos outros, quanto à técnica de determinação do polinómio interpolador. Os erros de arredondamento diferem em cada caso, pois as operações aritméticas são conduzidas de formas distintas, em cada método. Dentre os métodos analisados, encontramos os melhores resultados com a utilização dos polinômios de Tchebychev, o qual apresenta importantes vantagens em relação a outras técnicas, comforme foi citado no capítulo 2. Dentre elas podemos citar a propriedade de minimizar os erros, uniformizando-os.

Para uma verificação da eficiência e da precisão dos resultados apresentados pelo método por polinômios de Tchebychev, em comparação aos resultados apresentados por outros métodos, foi feita uma parametrização das seções de choque macroscópicas de um elemento combustível com e sem veneno queimável, em função da temperatura do combustível, utilizando o método por polinômios de Lagrange como base comparativa.

Os polinômios de Lagrange são polinômios de interpolação de um conjunto de pontos na forma de Lagrange, onde em sua definição, dado um conjunto de k+1 pontos: $(x_0, y_0),...,(x_k, y_k)$ com todos x_j distintos, o polinômio de interpolação de um conjunto de pontos na forma de Lagrange é a combinação linear dos polinômios da base de Lagrange:

$$L(x) = \sum_{j=0}^{k} y_{j} l_{j}(x), \qquad (7.5)$$

com polinômios da base de Lagrange dados por:

$$l_{j}(x) = \prod_{i=0, j \neq i}^{k} \frac{x - x_{i}}{x_{j} - x} = \frac{x - x_{0}}{x_{j} - x_{0}} \cdots \frac{x - x_{j-1}}{x_{j} - x_{j-1}} \cdot \frac{x - x_{j+1}}{x_{j} - x_{j+1}} \cdots \frac{x - x_{k}}{x_{j} - x_{k}}$$
(7.6)

Para a análise comparativa entre esses diferentes método foi utilizada a temperatura do combustível de 1248 K, mantendo-se os demais parâmetros com os valores de referência. Em seguida, foi interpolado esse valor nas expansões polinomiais de seção de choque macroscópicas obtidas pelo método de Lagrange e de Tchebychev, e comparados esses resultados com os resultados do sistema SCALE,

utilizando os mesmos dados de entrada. Após o processamento computacional do SCALE foi feita uma comparação dos desvios dos resultados de seção de choque.

Por meio das tabelas 7.11 e 7.12 em comparação com a tabela 7.1 e 7.2 respectivamente, pode-se observar que os desvios dos valores de seção de choque utilizando o método de Tchebychev têm uma melhor descrição do comportamento da seção de choque macroscópica por apresentar menores desvios dos valores apresentados pelo sistema SCALE, devido as vantagens e características próprias dos polinômios de Tchebychev.

Tabela 7.11 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Lagrange em função da temperatura do combustível de 1248 K para um elemento combustível sem veneno queimável.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial	Interpolação	SCALE	Desvio
Fissão	1	0,002296	0,002296	0,002302	0,26064%
	2	0,040691 - 0,000002y	0,038195	0,039869	4,1987%
Total	1	0,523127 + 0,000001y	0,524375	0,524373	0,0004%
	2	1,168575 + 0,000033y	1,209759	1,175940	2,8759%
Espalh	1	0,512259 + 0,000006y	0,519747	0,514370	1,0454%
	2	1,088000	1,088000	1,088030	0,0028%
Absorção	1	0,008979 + 0,000002y	0,011475	0,010051	14,1677%
	2	0,088516	0,088516	0,087908	0,6916%
Captura	1	0,006682 + 0,000002y	0,009178	0,007749	18,4411%
	2	0,047825 + 0,000001y	0,049073	0,048039	2,1524%
Nu-Fissão	1	0,005971	0,005971	0,005937	0,5727%
	2	0,098554 - 0,000002y	0,096058	0,097148	9,7148%
Transporte	1	0,220358 + 0,000003y	0,224102	0,221106	1,3550%
	2	0,706950 - 0,000007y	0,698214	0,704536	0,8973%
Espalh 1-1		0,495935	0,495935	0,496874	0,1890%
Espalh 1-2		0,018139 - 0,000001y	0,016891	0,017496	3,4579%
Espalh 2-2		1,088000	1,088000	1,088030	0,0027%

Analisando os desvios apresentados pelas tabelas 7.11 e 7.12 podemos observar desvios com valores acima de 18%, o que faz-nos constatar a vantagens da utilização dos polinômios de Tchebychev para esse tipo de análise.

Tabela 7.12 – Comparação entre o SCALE e a expansão polinomial de Lagrange em função da temperatura do combustível de 1248 K para um elemento combustível com veneno queimável.

Seção de Choque	Grupo	Expansão polinomial	Interpolação	SCALE	Desvio
Fissão	1	0,002216	0,002216	0,002206	0,45%
	2	0,042765 - 0,000001y	0,041517	0,042129	1,4522%
Total	1	0,525377 + 0,000003y	0,529121	0,527014	0,3997%
	2	1,237739 + 0,000001y	1,238987	1,236870	0,1711%
Espalh	1	0,517103 + 0,000002y	0,519599	0,518000	0,3088%
	2	1,168585 + 0,000008y	1,178569	1,170310	0,7057%
Absorção	1	0,008053 + 0,000002y	0,010549	0,009056	16,492%
	2	0,067410 - 0,000001y	0,066162	0,066565	0,6054%
Captura	1	0,005837 + 0,000002y	0,008333	0,006850	21,659%
	2	0,024645	0,024645	0,024436	0,8544%
Nu-Fissão	1	0,005699	0,005699	0,005680	0,3343%
	2	0,104218 - 0,000002y	0,101722	0,102655	0,9088%
Transporte	1	0,214168	0,214168	0,214016	0,0710%
	2	0,748699	0,748699	0,747808	0,1191%
Espalh 1-1		0,499010 + 0,000003y	0,502754	0,498854	0,7817%
Espalh 1-2		0,019891 - 0,000001y	0,018643	0,019145	2,6226%
Espalh 2-2		1,168585 + 0,000008y	1,178569	1,170310	0,7057%

CAPÍTULO 8

ANÁLISE FINAL E CONCLUSÕES

Um método de parametrização por meio da expansão polinomial por polinômios de Tchebychev foi desenvolvido para a geração de uma biblioteca de funções de seções de choques macroscópicas homogeneizadas de fissão, absorção, captura, espalhamento, total, nu-fissão e transporte, de um elemento combustível do tipo PWR, a dois grupos de energia em função de parâmetros nucleares possibilitando a realização de cálculos neutronicos a poucos grupos sem a necessidade de se efetuar um complexo procedimento de cálculo para a geração dessas seções de uma simulação computacional convencional.

O método desenvolvido utiliza uma importante propriedade dos polinômios de Tchebychev, a qual minimiza o erro, uniformizando-o, fazendo o erro ficar quase uniforme para o intervalo de análise.

As expansões polinomiais das seções de choque macroscópicas homogeneizadas obtidas do método de cálculo desenvolvido, para os dois casos exemplos, apresentaram além de uma boa precisão, uma boa descrição física do comportamento das seções de choque em função dos parâmetros, ao longo de todo o intervalo de análise.

Nos cálculos para o elemento combustível do tipo PWR sem veneno queimável, obteve-se funções parametrizadas que descreveram o comportamento da seção de choque desde o aumento da taxa de absorção, com a elevação da temperatura do combustível devido ao efeito Doppler, até o aumento da taxa de fissão com o aumento da densidade do moderador.

Nos cálculos para o elemento combustível do tipo PWR com veneno queimável, obteve-se funções parametrizadas que descreviam exatamente os efeitos provocados pela presença do Gd_2O_3 no meio, o qual modificou o comportamento das seções de choques, pela alta elevação da taxa de absorção.

Testes entre os resultados provenientes da expansão polinomial e os provenientes do SCALE e do MCNP, comprovaram a eficiência do método.

A comparação entre os resultados das seções de choques, oriundas da expansão polinomial e pelo uso do SCALE, apresentaram excelente concordância, onde se obteve desvios de valores de seção de choque entre os métodos menores que 1,175%.

Nos testes realizados pela comparação dos coeficientes de reatividade de temperatura e pela comparação dos fatores de fissão rápida, entre as funções de expansão e o SCALE, obtiveram-se resultados com desvios menores que 0,35% e 0,002% respectivamente. Por ser um parâmetro de projeto, os coeficientes de reatividade de temperatura representaram uma boa base de comparação para esse tipo de analise.

Como sugestão para trabalhos futuros recomenda-se: o uso deste método para a parametrização de seções de choque macroscópicas para elementos combustíveis de reatores rápidos; o uso deste método para a parametrização de seções de choque macroscópicas para elementos combustíveis de reatores de pequeno porte; o uso deste método de parametrização na representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear do tipo PWR; o uso deste método de parametrização na representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear do tipo PWR; o uso deste método de parametrização na representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear se para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear rápido; o uso deste método de parametrização para a representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear rápido; o uso deste método de parametrização para a representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear rápido; o uso deste método de parametrização para a representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear rápido; o uso deste método de parametrização para a representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear rápido; o uso deste método de parametrização para a representação dos dados nucleares para uso em multiciclos de operação de um reator nuclear rápido; o uso em multiciclos de operação de um reator nuclear de pequeno porte.

APÊNDICE A

PROGRAMAS EM FORTRAN PARA COLAPSAÇÃO DE GRUPO E CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE TCHEBYCHEV.

São apresentados a seguir, dois programas em FORTRAN, para a determinação dos coeficientes dos polinômios de Tchebychev e para a colapsação das seções de choque.

O primeiro programa foi desenvolvido tendo como objetivo o colapso de 238 grupos para 02 grupos de energia. Ele fornece os valores das seções de choque colapsadas para 2 grupos de energia.

O segundo programa foi desenvolvido tendo como objetivo o cálculo dos coeficientes do polinômio de tchebychev, o qual seguiu uma seqüência de leitura de dados de entrada num corpo principal, acompanhado de sub-rotinas de cálculo da biblioteca NAG ("*Numerical Algorithms Gruop*").

Programa 1 - Colapsação de Grupos de Energia

******* PROGRAM LEITURA DE DADOS E COLAPSAÇÃO DE 238 GRUPOS PARA 2 GRUPOS DE **ENERGIA** ******* PROGRAM LEITURA DE DADOS DIMENSION Ft1(900),Fs1(900),Fa1(900),Fc1(900),Ff1(900),Fnf1(900) DIMENSION FR11(900) OPEN(1, FILE='INPUT-0.25-2-300.txt', STATUS='OLD') OPEN(2, FILE='0UTPUT-0.25-2-300', STATUS='UNKNOWN') LENDO O PRIMEIRO GRUPO DE VARIÁVEIS DO INPUT (Seção de Choque total, espalhamento) READ(1,2) 2 FORMAT(//////) DO 20 I=1,238 READ(1,10)Ft1(I),Fs1(I) 9 FORMAT(5X,/) 5 FORMAT(3X, 'ELEMENTO COMBUSTÍVEL'/) 6 FORMAT(3X,'SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL, ESPALHAMENTO'/) 10 FORMAT(7X,E11.4,1X,E11.4) **20 CONTINUE** WRITE(2,5) WRITE(2,9) WRITE(2,6) WRITE(2,10)(Ft1(I),Fs1(I),I=1,238)

LENDO O SEGUNDO GRUPO DE VARIÁVEIS DO INPUT (Seção de choque de captura)

```
READ(1,12)
 12 FORMAT(////)
     DO 22 I=1,238
  READ(1,14)Fc1(I)
 19 FORMAT(5X,/)
 11 FORMAT(3X,'2'/)
 13 FORMAT(3X, 'SEÇÃO DE CHOQUE DE CAPTURA'/)
 14 FORMAT(55X,E11.4)
 22 CONTINUE
  WRITE(2,19)
     WRITE(2,11)
     WRITE(2,13)
     WRITE(2,12)
     WRITE(2.14)(Fc1(I),I=1.238)
LENDO O TERCEIRO GRUPO DE VARIÁVEIS DO INPUT (Seção de choque de absorção)
READ(1,1112)
1112 FORMAT(////)
     DO 1122 I=1,238
  READ(1,1114)Fa1(I)
1119 FORMAT(5X,/)
1111 FORMAT(3X,'2'/)
1113 FORMAT(3X, 'SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO'/)
1114 FORMAT(7X,E11.4)
1122 CONTINUE
  WRITE(2,1119)
     WRITE(2,1111)
     WRITE(2,1113)
     WRITE(2,1112)
     WRITE(2,1114)(Fa1(I),I=1,238)
************
LENDO O QUARTO GRUPO DE VARIÁVEIS DO INPUT (Seção de choque de fissão)
*****
  READ(1.16)
 16 FORMAT(////)
     DO 24 I=1.238
  READ(1,18)Ff1(I)
 29
     FORMAT(5X,/)
 18 FORMAT(7X,E11.4)
 21 FORMAT(3X,'3'/)
 23 FORMAT(3X, 'SEÇÃO DE CHOQUE DE FISSÃO'/)
 24 CONTINUE
     WRITE(2,29)
     WRITE(2,21)
     WRITE(2,23)
     WRITE(2,16)
     WRITE(2,18)(Ff1(I),I=1,238)
LENDO O QUINTO GRUPO DE VARIÁVEIS DO INPUT (Seção de choque de nu*fissão)
***********
  READ(1,516)
516 FORMAT(////)
     DO 524 I=1,238
  READ(1,518)Fnf1(I)
529
     FORMAT(2X,/)
518 FORMAT(55X,E11.4)
521 FORMAT(3X,'5'/)
523 FORMAT(3X, 'SEÇÃO DE CHOQUE NU*FISSÃO'/)
```

```
524 CONTINUE
    WRITE(2,529)
    WRITE(2,521)
    WRITE(2,523)
    WRITE(2,516)
    WRITE(2,518)(Fnf1(I),I=1,238)
LENDO O SEXTO GRUPO DE VARIÁVEIS DO INPUT
READ(1,36)
 36 FORMAT(//)
    DO 34 I=1.239
 READ(1,38)FR11(I)
 39 FORMAT(4X,/)
 38 FORMAT(101X,E11.4)
 31 FORMAT(3X.'4'/)
 33 FORMAT(3X, 'FLUXO TOTAL'/)
 34 CONTINUE
    WRITE(2,39)
    WRITE(2,31)
    WRITE(2,33)
    WRITE(2,36)
    WRITE(2,38)(FR11(I),I=1,239)
UNIT 1
*****************
11 - CÁLCULO DO COLÁPSO DE 238 PARA 2 GRUPOS DE ENERGIA 0.750-2
SEÇÃO DE CHOQUE DE FISSÃO
A - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO RÁPIDO) E COLAPSO DA SECÃO DE CHOQUE DE FISSÃO
FR11T=0
    Ff11T=0
    DO 88 I=1.148
    FR11T=FR11T+FR11(I)
 88 Ff11T=Ff11T+Ff1(I)*FR11(I)
 Ffr1=Ff11T/FR11T
    FORMAT(8X, 'GRUPO RÁPIDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE FISSÃO'/)
 87
 89 FORMAT(7X,'FR11T=',E11.4,1X,'Ff11T=',E11.4,1X,'Ffr1=',E9.3)
 WRITE(2,12)
 WRITE(2,87)
    WRITE(2,89) FR11T,Ff11T,Ffr1
B - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO TÉRMICO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE
FISSÃO
*****************
 FR11T=0
    Ff11T=0
    DO 98 I=149.238
    FR11T=FR11T+FR11(I)
98 Ff11T=Ff11T+Ff1(I)*FR11(I)
 Ffr1=Ff11T/FR11T
    FORMAT(8X,'GRUPO TÉRMICO DA SECÃO DE CHOQUE DE FISSÃO'/)
 97
 99 FORMAT(7X, 'FR11T=', E11.4, 7X, 'Ff11T=', E11.4, 1X, 'Ffr1=', E9.3)
 WRITE(2.12)
    WRITE(2,97)
    WRITE(2,99) FR11T,Ff11T,Ffr1
```

SEÇÃO DE CHOQUE DE TOTAL C - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO RÁPIDO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL FR11T=0 Ft11T=0 DO 108 I=1,148 FR11T=FR11T+FR11(I) 108 Ft11T=Ft11T+Ft1(I)*FR11(I) Ftr1=Ft11T/FR11T FORMAT(8X,'GRUPO RÁPIDO DA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL'/) 107 109 FORMAT(7X,'Ft11T=',E11.4,1X,'Ftr1=',E9.3) WRITE(2.12) WRITE(2,107) WRITE(2.109) Ft11T.Ftr1 D - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO TÉRMICO) E COLAPSO DA SECÃO DE CHOQUE TOTAL FR11T=0Ft11T=0 DO 208 I=149,238 FR11T = FR11T + FR11(I)208 Ft11T=Ft11T+Ft1(I)*FR11(I) Ftr1=Ft11T/FR11T 207 FORMAT(8X, 'GRUPO TÉRMICO DA SEÇÃO DE CHOQUE TOTAL'/) 209 FORMAT(7X,'Ft11T=',E11.4,1X,'Ftr1=',E9.3) WRITE(2,12) WRITE(2,207) WRITE(2,209) Ft11T,Ftr1 *************** SECÃO DE CHOQUE DE ESPALHAMENTO E - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO RÁPIDO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE **ESPALHAMENTO** FR11T=0 Fs11T=0DO 308 I=1,148 FR11T=FR11T+FR11(I) 308 Fs11T=Fs11T+Fs1(I)*FR11(I) Fsr1=Fs11T/FR11T FORMAT(8X,'GRUPO RÁPIDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ESPALHAMENTO'/) 307 309 FORMAT(7X,'Fs11T=',E11.4,1X,'Fsr1=',E9.3) WRITE(2,12) WRITE(2,307) WRITE(2,309) Fs11T,Fsr1 ***** F - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO TÉRMICO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE **ESPALHAMENTO** FR11T=0 Fs11T=0DO 408 I=149,238 FR11T=FR11T+FR11(I) 408 Fs11T=Fs11T+Fs1(I)*FR11(I) Fsr1=Fs11T/FR11T FORMAT(8X, 'GRUPO TÉRMICO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ESPALHAMENTO'/) 407 409 FORMAT(7X,'Fs11T=',E11.4,1X,'Fsr1=',E9.3) WRITE(2,12)

WRITE(2,407) WRITE(2,409) Fs11T,Fsr1 SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO G - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO RÁPIDO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORCÃO FR11T=0Fa11T=0 DO 508 I=1,148 FR11T=FR11T+FR11(I) 508 Fa11T=Fa11T+Fa1(I)*FR11(I) Far1=Fa11T/FR11T FORMAT(8X, 'GRUPO RÁPIDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO'/) 507 509 FORMAT(7X,'Fa11T=',E11.4,1X,'Far1=',E9.3) WRITE(2,12) WRITE(2,507) WRITE(2,509) Fa11T,Far1 H - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO TÉRMICO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO ********* FR11T=0Fa11T=0 DO 608 I=149,238 FR11T=FR11T+FR11(I) 608 Fa11T=Fa11T+Fa1(I)*FR11(I) Far1=Fa11T/FR11T FORMAT(8X,'GRUPO TÉRMICO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE ABSORÇÃO'/) 607 609 FORMAT(7X,'Fa11T=',E11.4,1X,'Far1=',E9.3) WRITE(2,12) WRITE(2,607) WRITE(2,609) Fa11T,Far1 SECÃO DE CHOOUE DE CAPTURA I - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO RÁPIDO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE CAPTURA FR11T=0 Fc11T=0DO 708 I=1,148 FR11T=FR11T+FR11(I) 708 Fc11T=Fc11T+Fc1(I)*FR11(I) Fcr1=Fc11T/FR11T FORMAT(8X, 'GRUPO RÁPIDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE CAPTURA'/) 707 709 FORMAT(7X,'Fc11T=',E11.4,1X,'Fcr1=',E9.3) WRITE(2,12) WRITE(2,707) WRITE(2,709) Fc11T,Fcr1 *********************** J - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO TÉRMICO) E COLAPSO DA SECÃO DE CHOQUE DE CAPTURA FR11T=0 Fc11T=0DO 808 I=149,238 FR11T=FR11T+FR11(I) 808 Fc11T=Fc11T+Fc1(I)*FR11(I)

Fcr1=Fc11T/FR11T 807 FORMAT(8X, 'GRUPO TÉRMICO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE CAPTURA'/) 809 FORMAT(7X,'Fc11T=',E11.4,1X,'Fcr1=',E9.3) WRITE(2,12) WRITE(2,807) WRITE(2,809) Fc11T,Fcr1 SEÇÃO DE CHOQUE DE NU*FISSÃO L - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO RÁPIDO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE NU*FISSÃO ***************** FR11T=0 Fnf11T=0 DO 908 I=1.148 FR11T=FR11T+FR11(I) 908 Fnf11T=Fnf11T+Fnf1(I)*FR11(I) Fnfr1=Fnf11T/FR11T FORMAT(8X,'GRUPO RÁPIDO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE NU*FISSÃO'/) 907 909 FORMAT(7X,'Fnf11T=',E11.4,1X,'Fnfr1=',E9.3) WRITE(2,12) WRITE(2,907) WRITE(2,909) Fnf11T,Fnfr1 J - SOMA DOS FLUXOS (GRUPO TÉRMICO) E COLAPSO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE NU*FISSÃO FR11T=0 Fnf11T=0 DO 1008 I=149,238 FR11T=FR11T+FR11(I) 1008 Fnf11T=Fnf11T+Fnf1(I)*FR11(I) Fnfr1=Fnf11T/FR11T FORMAT(8X,'GRUPO TÉRMICO DA SEÇÃO DE CHOQUE DE NU*FISSÃO'/) 1007 1009 FORMAT(7X, 'Fnf11T=', E11.4, 1X, 'Fnfr1=', E9.3) WRITE(2.12) WRITE(2,1007) WRITE(2,1009) Fnf11T,Fnfr1 STOP END Programa 2 - Cálculo dos Coeficientes do Polinômio de Tchebychev ***** PROGRAM CÁLCULO DOS COEFICIENTES DO POLINÔMIO DE TCHEBYCHEV DIMENSION A(100), F(400), FF(400), W(400), WORK(1500), X(400) DIMENSION Y(20), XMAX(20), XMIN(20) INTEGER M(20) EXTERNAL E02CAF, E02CBF OPEN(1, FILE='INPUT-espalhamento-t.DAT', STATUS='OLD') OPEN(2, FILE='OUTPUT-espalhamento-t.OUT', STATUS='UNKNOWN') С NMAX=20 MTMAX=400 NA=100 NWORK=1500 WRITE(2,110) 110 FORMAT('Resultados') 20 READ(1,*,END=120) N,K,L WRITE(2,*)

```
IF (N.GT.0 .AND. N.LE.NMAX)THEN
       MJ=0
       DO 40 I=1,N
       READ (1,*)Y(I),MI, XMIN(I),XMAX(I)
       M(I)=MI
       MJ=MJ+MI
 40 CONTINUE
   IF (MTMAX.LT.MJ)THEN
       WRITE(2,99999) 'MTOT PEQUENO', MJ
       STOP
       END IF
   READ(1,*)(X(I),F(I),W(I),I=1,MJ)
       IFAIL=0
       CALL E02CAF(M,N,K,L,X,Y,F,W,MTMAX,A,NA,XMIN,XMAX,Y,1,Y,1,
  &WORK,NWORK,IFAIL)
       MI=0
       WRITE(2,*) 'DATA Y DATA X DATA F FITTED F RESIDUAL'
       WRITE(2,*)
       DO 80 IR= 1,N
   IT=MI+1
       MI=MI+M(IR)
       YMAX=Y(N)
       IF (N.EQ. 1) YMAX=YMAX+1
       IFAIL=0
       CALL E02CBF(IT,MI,K,L,X,XMIN(IR),XMAX(IR),Y(IR),Y(1),YMAX,
  &FF,A,NA,WORK,NWORK,IFAIL)
       DO 60 I=IT,MI
       WRITE(2,99998) Y(IR), X(I), F(I), FF(I), FF(I)-F(I)
 60 CONTINUE
   WRITE(2,*)
 80 CONTINUE
   WRITE(2,*) 'COEFICIENTE DE CHEBYCHEV'
       WRITE(2,*)
       DO 100 J=1,K+1
       WRITE(2,99997)(A(I),I=1+(J-1)*(L+1),J*(L+1))
 100 CONTINUE
   GO TO 20
       END IF
99999 FORMAT(1X,A,I5)
99998 FORMAT(1X,4F11.4,E11.2)
99997 FORMAT(1X,6F11.4)
 120 STOP
       END
```

APÊNDICE B

ESPECIFICAÇÃO DA FERRAMENTA DE TRABALHO COMPUTACIONAL

Para o processamento computacional do sistema de códigos SCALE 6.1, e de todos os programas utilizados como base de cálculo neste trabalho, foi utilizado a seguinte ferramenta:

- Marca: TOSHIBA;
- Modelo: SATELLITE P855-S5200;
- Memoria Instalada (RAM): 8.00 GB;
- Tipo de Sistema: 64-bit sistema operacional;
- Número de Modelo: PSPKAU-00F009;
- Categoria: Computador Notebook;
- Processador: Intel(R), Core(TM) i7-3610QM CPU@ 2.30GHz de terceira geração com controlador DRAM – 0154.

APÊNDICE C

ESTRUTURA DOS GRUPOS DE ENERGIA

Grupo de Energia	Limite de Energia
(No)	(eV)
1	2.00000E+07
2	1.73330E+07
3	1.56830E+07
4	1.45500E+07
5	1.38400E+07
6	1.28400E+07
7	1.20100E+07
8	8 18730E+06
9	6.43400E+06
10	4 80000E+06
10	4.30400E+06
12	3.00000E+06
12	2 47900F+06
14	2.17200E+06
15	1 85000F+06
15	1.0000E+06
10	1.30000E+06
17	1.40000E+00
10	1.33000E+06
20	1.31700E+00 1 25000E+06
20	1.23000E+00 1 20000E+06
21	1.20000E+00
22	1.10000E+00
23	9 20000E+05
25	9.0000E+05
25	8 75000E+05
20	8.61100E+05
28	8 20000E+05
20	7 50000E+05
30	6 79000E+05
31	6.70000E+05
32	6.0000E+05
32	5.73000E+05
33	5.75000E+05
34	/ 00520E+05
35	4.77520E+05
30	4.70000E+03
37	4.40000E+03
30	4.20000E+03
39	4.0000E+03
40	3.30000E+03
Grupo de Energia	Limite de Energia
------------------	-------------------
(No)	(eV)
41	2.70000E+05
42	2.00000E+05
43	1.50000E+05
44	1.28300E+05
45	1.00000E+05
46	8.50000E+04
47	8.20000E+04
48	7.50000E+04
49	7.30000E+04
50	6.00000E+04
51	5.2000E+04
52	5.00000E+04
53	4.50000E+04
54	3.00000E+04
55	2.50000E+04
56	1.70000E+04
57	1.30000E+04
58	9.50000E+03
59	8.03000E+03
60	6.00000E+03
61	3 90000E+03
62	3.74000E+03
63	3.00000E+03
64	2 58000E+03
65	2.30000E+03
66	2.2000E+03
67	1.80000E+03
68	1.55000E+03
69	1.50000E+03
70	1.15000E+03
71	9.50000E+02
72	6.83000E+02
73	6.70000E+02
74	5.50000E+02
75	3.05000E+02
76	2.85000E+02
77	2.40000E+02
78	2.10000E+02
79	2.07500E+02
80	1.92500E+02
81	1.86000E+02
82	1.22000E+02
83	1.19000E+02
84	1.15000E+02
85	1.08000E+02
86	1.00000E+02

Grupo de Energia	Limite de Energia
(No)	(eV)
87	9.00000E+01
88	8.20000E+01
89	8.00000E+01
90	7.60000E+01
91	7.20000E+01
92	6.75000E+01
93	6.50000E+01
94	6.10000E+01
95	5.90000E+01
96	5.34000E+01
97	5.20000E+01
98	5.06000E+01
99	4.92000E+01
100	4.83000E+01
101	4.70000E+01
102	4.52000E+01
103	4.40000E+01
104	4.24000E+01
105	4.10000E+01
106	3.96000E+01
107	3.91000E+01
108	3.80000E+01
109	3.70000E+01
110	3.55000E+01
111	3.46000E+01
112	3.37500E+01
113	3.32500E+01
114	3.17500E+01
115	3.12500E+01
116	3.00000E+01
117	2.75000E+01
118	2.50000E+01
119	2.25000E+01
120	2.10000E+01
121	2.00000E+01
122	1.90000E+01
123	1.85000E+01
124	1.70000E+01
125	1.60000E+01
126	1.50999E+01
127	1.44000E+01
128	1.37500E+01
129	1.29000E+01
130	1.19000E+01
131	1.15000E+01
132	1.00000E+01

(No) (eV) 133 9.09999E+00 134 8.09999E+00 135 7.15000E+00 136 7.00000E+00 137 6.75000E+00 138 6.50000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00	
133 9.09999E+00 134 8.09999E+00 135 7.15000E+00 136 7.00000E+00 137 6.75000E+00 138 6.50000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00	
134 8.09999E+00 135 7.15000E+00 136 7.00000E+00 137 6.75000E+00 138 6.50000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00	
135 7.15000E+00 136 7.00000E+00 137 6.75000E+00 138 6.50000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00	
136 7.00000E+00 137 6.75000E+00 138 6.50000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00	
137 6.75000E+00 138 6.50000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00	
137 6.75000E+00 138 6.50000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00	
130 0.0000E+00 139 6.25000E+00 140 6.00000E+00 141 5.40000E+00	
100 6.0000E+00 140 6.0000E+00 141 5.40000E+00	
1/1 5.40000E+00	
141 $5.40000E+00142$ $5.00000E+00$	
142 $3.0000E+00143$ $4.75000E+00$	
143 4.75000 ± 00	
144 $4.0000E+00145$ $3.72000E+00$	
145 3.75000 ± 00	
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	
147 3.13000E+00	
148 3.04999E+00	
149 3.00000E+00	
150 2.96999E+00	
151 2.87000E+00	
152 2.77000E+00	
153 2.66999E+00	
154 2.57000E+00	
155 2.46999E+00	
156 2.37999E+00	
157 2.29999E+00	
158 2.20999E+00	
159 2.12000E+00	
160 2.00000E+00	
161 1.94000E+00	
162 1.86000E+00	
163 1.77000E+00	
164 1.67999E+00	
165 1.58999E+00	
166 1.50000E+00	
167 1.45000E+00	
168 1.40000E+00	
169 1.34999E+00	
170 1.29999E+00	
171 1.25000E+00	
172 1.22499E+00	
173 1.2000E+00	
174 1.17499E+00	
175 1 15000F+00	
176 1 13999F+00	
177 1 12999F+00	
178 1.12000E+00	

Grupo de Energia	Limite de Energia
(No)	(eV)
179	1.11000E+00
180	1.09999E+00
181	1.08999E+00
182	1.08000E+00
183	1.07000E+00
184	1.05999E+00
185	1.04999E+00
186	1.04000E+00
187	1.03000E+00
188	1.02000E+00
189	1.00999E+00
190	1.00000E+00
191	9.75000E-01
192	9.50000E-01
193	9.25000E-01
194	9.00000E-01
195	8.50000E-01
196	8.00000E-01
197	7.50000E-01
198	7.00000E-01
199	6.50000E-01
200	6.25000E-01
201	6.00000E-01
202	5.50000E-01
203	5.00000E-01
204	4.50000E-01
205	4.00000E-01
206	3.75000E-01
207	3.50000E-01
208	3.25000E-01
209	3.00000E-01
210	2.75000E-01
211	2.50000E-01
212	2.25000E-01
213	2.00000E-01
214	1.75000E-01
215	1.50000E-01
216	1.25000E-01
217	1.00000E-01
218	9.00000E-02
219	8.00000E-02
220	7.00000E-02
221	6.00000E-02
222	5.00000E-02
223	4.00000E-02
224	3.00000E-02

Grupo de Energia	Limite de Energia
(No)	(eV)
225	2.53000E-02
226	1.00000E-02
227	7.50000E-03
228	5.00000E-03
229	4.00000E-03
230	3.00000E-03
231	2.50000E-03
232	2.00000E-03
233	1.50000E-03
234	1.20000E-03
235	1.00000E-03
236	7.50000E-04
237	5.00000E-04
238	1.00000E-04
239	1.00000E-05

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] VYACHESLAV G. Zimin, ANDREY A. Semenov, Building neutron cross section dependencies for few-group reactor calculations using stepwise regression, Annals of Nuclear Energy Vol. 32, issue 1, January 2005, pg. 119-136;

[2] PAVEL, M. Bokov, Automated few-group cross-section parameterization based on quasi-regression, Annals of Nuclear Energy 36 (2009) 1215-1223;

[3] Leal, L.C.; Hermann, O.W.; Bowman, S.M.; Parks, C.V., "Automatic rapid process for the generation of problem-dependent SAS2H/ORIGEN-S cross-section libraries", Nuclear Technology; Journal Volume: 127; Journal Issue: 1, Jul 1999.

[4] ŽIVANOVIĆ, Rastko, BOKOV, Pavel M. "Cross-section parameterization of the pebble bed modular reactor using the dimension-wise expansion model" Annals of Nuclear Energy 2010; 37(12):1763-1773;

[5] CHIHARA, T.S., An Introduction to Orthogonal Polynomials, Mathematics and its

Applications Series, Gordonand Breach, New York, 1978.

[6] RIVLIN, T.J., Chebyshev Polynomials, John Wiley & Sons Inc., New York, 1990.

[7] SPIEGEL, Murray Ralph, Schaum's outline series Mathematical of Formulas and Tables; McGraw-Hill,Inc., 1968.

[8] CLENSHAW, C.W. and HAYES, J.G. Curve and Surface Fitting. J. Inst. Maths. Applics., 1, 1965, pp. 164-183.

[9] HAYES, J. G. Curve fitting by polynomials in one variable. Numerical Approximation to Functions and Data, edited by J. G. Hayes. The Athlone Press, 1970, Chapter 5.

[10] CLENSHAW, C. W. A Note on the Summation of Chebyshev Series. MTAC, 9, pp. 118-120, 1955.

[11] COX, M. G. A Data-Fitting Package for the Non-Specialist User. Report NAC40, National Physical Laboratory, Teddington, Middlesex, 1973.

[12] GENTLEMAN, W.M. An Error Analysis of Goertzel's (Watt's), Method for Computing Fourrier Coefficients. Comp. J., 12, pp. 160-165, 1969.

[13] M. E. Dunn and N. M. Greene, "AMPX-2000: A Cross-Section Processing System for Generating Nuclear Data for Criticality Safety Applications," *Trans. Am. Nucl. Soc.* 86, 118–119 (2002).

[14] ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data, M.B. Chadwick, et. al., Nuclear Data Sheets Volume 112, Issue 12, December 2011, Pages 2887–2996

[15] JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering, K. Shibata, O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Iwamoto, A. Ichihara, S. Kunieda, S. Chiba, K. Furutaka, N. Otuka, T. Ohsawa, T. Murata, H. Matsunobu, A. Zukeran, S. Kamada, and J. Katakura: J. Nucl. Sci. Technol. 48(1), 1-30 (2011)

[16] JEFF-3.1 NEA/OECD; "The JEFF-3.1 project: Complete content of the JEFF-3.1 evaluated nuclear data library", June 2, 2005, NEA#0607

[17] Z. G. Ge et al.,"The Updated Version of Chinese Evaluated Nuclear Data Library," Journal of the Korean Physical Society, Vol. 59, No. 2, August 2011, pp. 1052-1056.

[18] D. F. Hollenbach and M. E. Dunn, "Status and Preliminary Testing of Continuous-Energy KENO V.a and KENO-VI," Proceedings of the 2005 NCSD Topical Meeting, Knoxville, Tennessee, September 19–22, 2005.

[19] The Westinghouse Pressurized Water Reactor Nuclear Power Plant, Westinghouse Electric Corporation - Water Reactor Divisions, 1984.

[20] DUDERSTADT, JAMES J., HAMILTON, LOUIS J. Nuclear Reactor Analysis, John Wiley & Sons, Inc. (1976).

[21] "SCALE – A modular code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation", NUREG/CR-0200, Rev. 6, 2000.

[22] MCNP — A General Monte Carlo, N-Particle Transport Code, Version 5, MCNP, MCNP5, and "MCNP Version 5" are trademarks of the Regents of the University of California, Los Alamos National Laboratory.

[23] ANGRA II – Relatório Final de Análise de Segurança – RFAS, Eletronuclear, Rev.1, Agosto 1999.

[24] JAN DUFEK, Building the nodal nuclear data dependences in a manydimensional state-variable space, Annals of Nuclear Energy Vol. 38, issue 7, July 2011, pg. 1569-1537;

[25] ANDREAS Fessier, DONALD L. Smith, 2002, Parameter sensitivities in nuclear reaction cross-section calculations, Annals of Nuclear Energy;

[26] DEMAZIÉRE, C.2009, Development of computational methods and their applications for analysis of nuclear power plants, International Journal of Nuclear Energy Science and Technology 4 (4), 287-298.

[27] M.-J. LEE, J. G. Joo, **D. Lee**, and SMITH, K. "Multigroup Monte Carlo Reactor Calculation with Coarse Mesh Finite Difference Formulation for Real Variance Reduction," *Proc. Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo 2010 (SNA + MC2010)*, Tokyo, Japan, October 17-21, 2010.

[28] M. ABRAMOWITZ, I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions with

Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, (Ninth Dover Printing, Tenth GPO Printing Edition) Dover, New York (1964);

[29] BOKOV, P.M., PRINSLOO, R.H., Tomašević, D.I., Reitsma, F., 2008. A quasiregression method for automated cross-section parameterization: PBMR benchmark example. In: PHYSOR'2008 – International Conference on Reactor Physics, Nuclear Power: A Sustainable Resource, Interlaken, Switzerland, September 14–19, 2008;

[30] V.G. ZIMIN, A.A. SEMENOV, Building neutron cross-section dependencies for few-group reactor calculations using step-wise regression, Annals of Nuclear Energy, 32 (2005), pp. 119–136;

[31] BJØRN THORLAKSEN, Construction of PWR Nuclear Cross Sections For Transient Calculations. Test of the Anti-Program against Two dim, Risø National Laboratory, DK 4000 Roskilde, Denmark, May 1981.

[32] PRINSLOO, R. H. ; BOKOV, P. M. ; STANDER, G. ; BOTES, D. An Automated Cross Section Parametrization Method for MTR Application, Annals of Nuclear Energy 36 (2009) 1215-1223;

[33] BOKOV, P. M.; PRINSLOO, R. "Cross-Section Parameterization Using Quasi-Regression Approach,". *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007),* Monterey, California, April 15-19 (2007).

[34] HUDDLESTON, R.E., CDC 6600 routines for the interpolation of data and of data with derivatives. Sandia Laboratories. Reprint SLL-74-0214, 1974.

[35] KROGH, F.T., Efficient algorithms for polynomial interpolation and numerical differentiation. Math. Comp., 24, pp. 185-190, 1970.

[36] COX, M. G. and Hayes, J.G. Curve Fitting: a Guide and Suite of Algorithms for the Non-Specialist User. Report NAC26, National Physical Laboratory, Teddington, Middlesex, 1973.