



## CÁLCULO DE TRANSMUTAÇÃO DE ACTINÍDEOS MENORES EM REATORES AVANÇADOS DE TIPO ADS

Patricia Kelly Taipe Torres

Dissertação de Mestrado 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 Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva  
Antonio Carlos Marques Alvim

Rio de Janeiro  
Abril de 2014

CÁLCULO DE TRANSMUTAÇÃO DE ACTINÍDEOS MENORES EM  
REATORES AVANÇADOS DE TIPO ADS

Patricia Kelly Taipe Torres

DISSERTAÇÃO 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 MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA  
NUCLEAR.

Examinada por:

---

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

---

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

---

Prof. José de Jesús Rivero Oliva, D.Sc.

---

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
ABRIL DE 2014

Taípe Torres, Patricia Kelly

Cálculo de transmutação de actínídeos menores em reatores avançados de tipo ADS/Patricia Kelly Taípe Torres. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2014.

XIII, 42 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Antonio Carlos Marques Alvim

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Nuclear, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 41 – 42.

1. Transmutação. 2. Actínídeos Menores. 3. Depleção. I. Silva, Fernando Carvalho da *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*A toda minha família porque  
mais que um sucesso meu, esta  
dissertação é um sucesso de  
todos nós. Teresa, Antedoro,  
Chio, Efrain, Pelayo, Helen,  
Jeanpierre, Kelly y Adriano.*

# Agradecimientos

Seja quem for, pequeno ou maior, toda ajuda causo um efeito determinante na elaboração e desenvolvimento deste trabalho e é por isso que quero agradecer um por um a todos pela contribuição, desde a ideia mais brilhante até pelo sorriso da manhã. Ao meu orientador Fernando Carvalho da Silva, lhe agradeço pela paciência, o apoio e a impecável direção no desenvolvimento nesse trabalho. Ao meu orientador Antonio Carlos Marques Alvim pelo apoio e as discussões construtivas na elaboração nesse trabalho. A minha mãe obrigada por me deixar partir e me dar a liberdade de poder escolher meu caminho, chegará já o momento em que possamos desfrutar juntas de nosso esforço. Ao meu pai obrigada por cada ligação e por se cuidar em minha ausência. A meu irmão Pelayo, sem tuas palavras no momento certo, não estaria nem mesmo acabando o mestrado, você foi quem me deu confiança desde o inicio. A Hidmer por ser, meu amigo, meu companheiro e por me ajudar para que estes dias aqui no Brasil não fossem tão frios. A todos os meus colegas, especialmente, Jilder e Elmer, obrigada por não poupar ferramentas de ajuda neste quebracabeças chamado dissertação. À Profa. Mariella e ao Prof. Carita, pelo impulso por estar aqui e o apoio durante a graduação. À turminha de mestrado, Eddie, Laís, Felipe e Fabricio, obrigada meninos pelas aulas de português e pela alegria de conhecê-los. Aos funcionarios do PEN, a Liliane, Josevalda, Reginaldo e Washington, obrigada pela sua disponibilidade. E agradecer pela bolsa de estudos à CAPES.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## CÁLCULO DE TRANSMUTAÇÃO DE ACTINÍDEOS MENORES EM REATORES AVANÇADOS DE TIPO ADS

Patricia Kelly Taipe Torres

Abril/2014

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva  
Antonio Carlos Marques Alvim

Programa: Engenharia Nuclear

Um dos pontos que suscita discussão e, conseqüentemente, desconfiança sobre o uso da energia nuclear como fonte de geração de energia elétrica é o que fazer com os elementos combustíveis usados. Estes elementos combustíveis possuem vários radionuclídeos (produtos de fissão de longa vida e actinídeos menores) que os tornam um sistema com radiotoxicidade muito alta. Uma possibilidade para resolver esta questão seria acondicioná-los em repositórios geologicamente adequados. Mas, atualmente, está em estudo a possibilidade de incinerar os produtos de fissão de longa vida e transmutar os actinídeos menores, que são os que mais contribuem para a radiotoxicidade, em reatores do tipo ADS. A transmutação destes actinídeos menores em reatores ADS diminuiria em muito esta radiotoxicidade. Mas os reatores ADS são reatores subcríticos guiados por uma fonte e a transmutação dos actinídeos menores necessita de um alto fluxo de nêutrons na região onde estes actinídeos se encontram. Sendo assim, estudos estão sendo feitos para determinar as intensidades adequadas da fonte e do fluxo de nêutrons, para um nível de subcriticalidade escolhido. Então, apresentamos neste trabalho os resultados dos estudos realizados, para um dado nível de subcriticalidade, mas que tem o intuito de mostrar a eficiência de um reator do tipo ADS em diminuir esta radiotoxicidade, considerando diferentes níveis de subcriticalidade e diferentes intensidades da fonte. Ou seja, um estudo de sensibilidade pode ser feito para esta finalidade.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

## CALCULATION OF MINOR ACTINIDES TRANSMUTATION IN ADS REACTORS

Patricia Kelly Taipe Torres

April/2014

Advisors: Fernando Carvalho da Silva  
Antonio Carlos Marques Alvim

Department: Nuclear Engineering

One of the points in debate and therefore of mistrust about the use of nuclear energy as a source of electricity generation is what to do with spent fuel elements. These fuel elements have several radionuclides (long-lived fission products and minor actinides) that turns them into a system with very high radiotoxicity. One possibility to solve this issue is to repackage them into suitable geological repositories. Studies are underway to investigate the possibility of incinerating long-lived fission products and transmute minor actinides, that are the main contributors to radiotoxicity, in ADS reactors. The transmutation of minor actinides in ADS reactors greatly diminishes this radiotoxicity. ADS are subcritical reactors guided by a source and transmutation of minor actinides requires high fluxes in the region where these actinides are. Therefore, studies are underway to determine the appropriate intensity of the source and neutron fluxes for a chosen level of subcriticality. In this work we present results of studies done, for a certain subcriticality level, aiming at showing the effectiveness of an ADS reactor to decrease radiotoxicity considering different levels of subcriticality and different source intensities, that is, a sensitivity study could be made for this purpose.

# Sumário

|   |            |
|---|------------|
| <b>Lista de Figuras</b>   | <b>x</b>   |
| <b>Lista de Tabelas</b>   | <b>xi</b>  |
| <b>Glossário</b>  | <b>xii</b> |
| <b>1 Introdução</b>   | <b>1</b>   |
| 1.1 Objetivo . . . . .  | 3          |
| 1.2 Apresentação . . . . .  | 3          |
| <b>2 Equações de Depleção</b>   | <b>4</b>   |
| 2.1 Definições . . . . .  | 4          |
| 2.2 Cadeias de Depleção . . . . .                                       | 6          |
| 2.3 Matriz de Depleção . . . . .  | 6          |
| 2.4 Aproximação Quase-estática . . . . .                                | 9          |
| 2.5 Matriz de Transição . . . . .                                       | 9          |
| <b>3 Cálculo Neutrônico</b>   | <b>11</b>  |
| 3.1 Equação da Continuidade de Nêutrons . . . . .                       | 11         |
| 3.2 Método de Diferenças Finitas . . . . .                              | 12         |
| 3.3 Equação de Balanço . . . . .  | 17         |
| 3.4 Matrizes de Discretização . . . . .                                 | 19         |
| 3.5 Fluxo Médio por Região . . . . .                                    | 21         |
| <b>4 Programa de Cálculo</b>  | <b>22</b>  |
| 4.1 Módulo Problema de Fonte Fixa . . . . .                             | 22         |
| 4.2 Módulo Cálculo de Depleção . . . . .                                | 22         |
| 4.3 Programa Cálculo de Transmutação . . . . .                          | 24         |
| 4.4 Módulo Problema de Autovalor . . . . .                              | 26         |
| <b>5 Análise de Resultados</b>  | <b>28</b>  |
| 5.1 Apresentação dos dados . . . . .                                    | 28         |
| 5.2 Resultados obtidos com o Programa Cálculo de Transmutação . . . . . | 32         |

|                                   |           |
|-----------------------------------|-----------|
| <b>6 Conclusões</b>               | <b>39</b> |
| <b>Referências Bibliográficas</b> | <b>41</b> |

# Lista de Figuras

|     |   |    |
|-----|---|----|
| 1.1 | Conceito de Transmutador. . . . .                               | 2  |
| 2.1 | Sistema composto de $M$ regiões. . . . .                        | 4  |
| 2.2 | Reações contidas na depleção isotópica . . . . .                | 5  |
| 2.3 | Cadeia de depleção dos Actinídeos. . . . .                      | 7  |
| 2.4 | Cadeias de depleção do Samário (a) e Xenônio (b) . . . . .      | 7  |
| 2.5 | Discretização temporal do ciclo de operação do reator . . . . . | 9  |
| 3.1 | Divisão da região $m$ em malhas. . . . .                        | 12 |
| 3.2 | Continuidade no ponto $x_n$ . . . . .                           | 13 |
| 4.1 | Fluxograma do problema de fonte fixa . . . . .                  | 23 |
| 4.2 | Fluxograma do cálculo de depleção . . . . .                     | 24 |
| 4.3 | Fluxograma do cálculo de transmutação . . . . .                 | 25 |
| 4.4 | Fluxograma do problema de autovalor . . . . .                   | 26 |
| 5.1 | Esquema do modelo nuclear. . . . .                              | 28 |
| 5.2 | Evolução do Np237 (a). . . . .                                  | 33 |
| 5.3 | Evolução do Am241 (b), Am242m (c) e Am242 (d), . . . . .        | 34 |
| 5.4 | Evolução do Am243 (e), Cm242 (f) e Cm244 (g). . . . .           | 35 |
| 5.5 | Evolução do $k_{eff}$ com o tempo. . . . .                      | 37 |
| 5.6 | Evolução da potência com o tempo. . . . .                       | 37 |

# Lista de Tabelas

|      |  |    |
|------|--|----|
| 5.1  | Dados Nucleares do Refletor . . . . .  | 29 |
| 5.2  | Concentração inicial dos actinídeos na região do combustível. . . . .                    | 29 |
| 5.3  | Dados Nucleares dos nuclídeos. . . . .   | 29 |
| 5.4  | Seções de choque microscópicas. . . . .  | 30 |
| 5.5  | Rendimentos . . . . .  | 31 |
| 5.6  | Concentração inicial dos AM na região de transmutação. . . . .                           | 31 |
| 5.7  | Intervalos de tempo de queima. . . . .   | 32 |
| 5.8  | Percentuais de transmutação dos AM depois de 300 dias de exposição<br>no reator. . . . . | 33 |
| 5.9  | Concentração Residual depois de 300 dias de exposição. . . . .                           | 36 |
| 5.10 | Variação do $k_{eff}$ . . . . .  | 37 |

# Glossário

- PWR : Pressurized Water Reactor
- AM : Actinídeos Menores
- PFLV : Produtos de Fissão de Longa Vida
- MOX : Mixed Oxide
- ADS : Accelerator Driven System
- P&T : Partitioning&Transmutation
- VQ : Veneno Queimável

# Capítulo 1

## Introdução

Na atualidade existem 437 reatores em operação no mundo, com uma capacidade geradora total de 372,1 GW(e), dos quais 257 são reatores de água leve (LWR) [1]. Um LWR típico gera cerca de 20-30 toneladas de combustível irradiado por ano [2]. Assim, o 96,3% da massa de combustível irradiado é composta de Urânio e produtos de fissão de curta vida, que não representam perigo radiológico a longo prazo. Desta massa tem-se 0,85% de Pu, 0,16% de AM (principalmente Np, Am e Cm) e 2,7% de PFLV tais como Sr90, Cs137, Tc99 e I129 sendo os dois primeiros isótopos com quase 30 anos de meia-vida, e os dois últimos com aproximadamente um milhão de anos de meia-vida.

A transmutação é a transformação nuclear que converte efetivamente um nuclídeo em outro. Sendo os AM radioativos de longa vida e de alto nível e os PFLV, os principais contribuintes dos resíduos radiativos, vem se pensando em fissionar os actínídeos e converter os PFLV, em isótopos estáveis ou de curta vida [3]. O Plutônio resultante da transmutação, pode ser reutilizado para subseqüentes recarregas de combustível MOX ou como material para manufaturar baterias nucleares. Uma alternativa de solução sustentável, que se baseia neste método, está sendo prevista pelos Sistemas Conduzidos por um Acelerador (ADS, Accelerator Driven System [4]), utilizando-se como uma opção de reprocessamento.

Desde 1990, os ADS estão sendo desenvolvidos com a finalidade de reduzir a radiotoxicidade do combustível nuclear irradiado, produção de energia e também como fonte de nêutrons. Tais núcleos dedicados provêm um grande potencial para uma redução significativa da radiotoxicidade dos actínídeos, criados a partir da depleção do combustível nuclear. O ADS, como se observa na figura 1.1 [5], é composto por um acelerador de alta energia capaz de produzir nêutrons, a partir de um feixe de partículas de alta energia dirigido a um alvo, causando reação de "spallation", da qual surgem nêutrons. Estes nêutrons de "spallation" são enviados a um núcleo subcrítico. Isto mantém o núcleo subcrítico estável, devido ao fato dele ser alimentado por uma fonte externa de nêutrons. Além disso, o ADS pode ser usado como

uma fonte de nêutrons controlada [6], já que trata-se de um sistema que poderia ser desligado simplesmente extinguindo o feixe de partículas de alta energia, em vez de precisar inserir barras de controle, por exemplo.

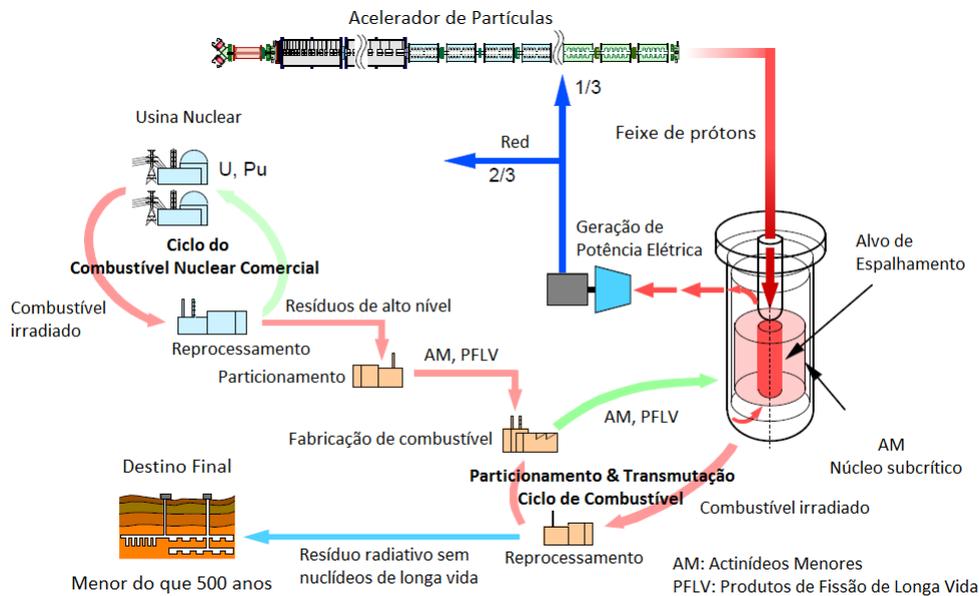


Figura 1.1: Conceito de Transmutador.

O Urânio e o Plutônio provenientes do combustível nuclear irradiado são reprocessados e separados dos resíduos de alto nível. Nestes últimos estão presentes os AM e PFLV. Os primeiros voltam ao ciclo do combustível para atuarem como recarga de combustível MOX, e os resíduos nucleares depois de passarem por P&T [7] (tipo de reprocessamento) tomarão parte na fabricação do combustível de reatores avançados. Assim, os AM e os PFLV reingressam no ciclo do combustível nuclear para serem transmutados e ainda aproveitar sua capacidade geradora de energia. Atendida a transmutação, os núclídeos de curta vida têm como destino final o armazenamento geológico e o resto volta para o ciclo de combustível.

O reprocessamento de combustível irradiado seguido do seu armazenamento geológico (temporário ou definitivo) ou o armazenamento direto (sem reprocessamento) são hoje algumas soluções previstas. A escala de tempo necessária para o armazenamento geológico excede o tempo do repositório. Isto é de profundo conhecimento, criando problemas de aceitação social em relação ao uso da energia nuclear. O conceito de P&T tem sido apontado em diversos estudos no passado e, mais recentemente, no estudo de reatores de Geração IV, como sendo uma estratégia que pode relaxar as restrições sobre o armazenamento geológico e que pode reduzir o período de monitoramento para escalas de tempo tecnológicas e gerenciáveis [8]. O tema no qual se centra esta dissertação é baseado no cálculo de transmutação dos materiais que compõem o núcleo do reator, mas com claro foco nas mudanças dos

AM, pois estes são, além dos PFLV, os principais fornecedores da radiotoxicidade de alto nível nos resíduos nucleares, que são gerados durante a operação do reator. O tópico da transmutação nuclear é de interesse em muitas áreas de física e aplicações nucleares, para a otimização de produção de núclídeos, transmutação de resíduos radiativos de longa vida e a evolução do ciclo do reator.

## 1.1 Objetivo

O objetivo desta dissertação é o cálculo de transmutação dos AM, este tema toma grande importância no momento de reduzir a quantidade de resíduos nucleares, que tem como destino final ou temporário, o armazenamento geológico.

## 1.2 Apresentação

Esta dissertação de mestrado está organizada em 6 capítulos. No capítulo 2, são apresentadas as equações de depleção que serão resolvidas com a aplicação do método numérico da matriz de transição. Aqui são apresentadas as cadeias de depleção usadas no cálculo de transmutação, além de ser empregada uma aproximação quase-estática do fluxo. No capítulo 3, é apresentado de forma sucinta o método de diferenças finitas aplicado na equação de difusão de nêutrons. Uma vez discretizada esta equação, a mesma será expressa em notação matricial. Aqui será usado o Algoritmo de Thomas e um método iterativo para resolver a equação de difusão. No capítulo 4, são ilustrados, mediante fluxogramas, o programa principal ‘Cálculo de Transmutação dos AM’ e os módulos empregados nele. No capítulo 5, são apresentados os resultados obtidos e são mostradas as concentrações residuais e os percentuais de transmutação. No capítulo 6 apresentamos as conclusões e a sugestão para o futuro trabalho de pesquisa.

# Capítulo 2

## Equações de Depleção

Neste capítulo são deduzidas as equações de depleção, tanto para os Actinídeos quanto para os PF, tratados nesta dissertação. Também mostra-se a forma dos diferentes elementos da matriz de depleção destas equações. Além disso, com a utilização da aproximação quase-estática [9], é apresentada a solução das equações de depleção, fazendo-se uso do método de cálculo de matriz de transição. São mostradas, também, as cadeias que foram usadas nos cálculos feitos nesta dissertação. Nesta dissertação todos os cálculos são realizados para dois grupos de energia, ou seja,  $g=1,2$ .

### 2.1 Definições

Na arquitetura de um método para resolver as equações de depleção, que serão aqui deduzidas, o núcleo do reator é dividido em um número finito de regiões espaciais, nas quais os parâmetros nucleares ( $\Sigma_{cg}$ ,  $\Sigma_{fg}$ ,  $\nu\Sigma_{fg}$ ,  $\Sigma_{gg'}$  e  $D_g$ ) são uniformes. Além disso, a concentração isotópica de cada nuclídeo é tomada como um valor médio na região de interesse. Uma representação da divisão espacial do núcleo do reator pode ser vista na figura 2.1.

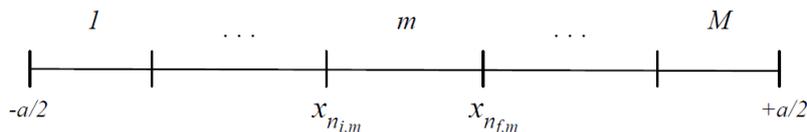


Figura 2.1: Sistema composto de  $M$  regiões.

Os parâmetros nucleares na posição  $x$  no tempo  $t$ , são representados da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}\Sigma_{cg}(x, t) &= \Sigma_{cg}^m(t) + \Sigma_{cg}^{H2O} + \Sigma_{cg}^{STRM} , \\ \Sigma_{fg}(x, t) &= \Sigma_{fg}^m(t) ,\end{aligned}$$

$$\nu\Sigma_{fg}(x, t) = \nu\Sigma_{fg}^m(t) ,$$

$$\Sigma_{21}(x, t) = \Sigma_{21}^m(t) + \Sigma_{21}^{H2O} + \Sigma_{21}^{STRM}$$

e

$$D_g(x, t) = \frac{1}{3\Sigma_{trg}^{H2O}} ,$$

para,  $x_{n_{i,m}} < x < x_{n_{f,m}}$  e  $g = 1, 2$ , pois os cálculos serão feitos para 2 grupos de energia apenas. Onde  $\Sigma_{cg}$  é a seção de choque macroscópica de captura no grupo  $g$ ; sendo  $\Sigma_{cg}^{H2O}$  para a água e  $\Sigma_{cg}^{STRM}$  para o material estrutural;  $\Sigma_{fg}$  é a seção de choque macroscópica de fissão no grupo  $g$ ;  $\nu\Sigma_{fg}$  é o produto do número médio de nêutrons emitidos na fissão pela seção de choque macroscópica de fissão do grupo  $g$ ;  $\Sigma_{21}$  é a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo 1 para o grupo 2; sendo  $\Sigma_{21}^{H2O}$  para a água e  $\Sigma_{21}^{STRM}$  para o material estrutural e  $D_g$  é o coeficiente de difusão no grupo  $g$ , sendo  $\Sigma_{trg}^{H2O}$  a seção de choque macroscópica de transporte da água no grupo  $g$ .

Além disso, para  $\Sigma_{xg}^m(t)$ , onde  $x$  representa o tipo de reação, tem-se que

$$\Sigma_{xg}^m(t) = \sum_i N_i^m(t) \sigma_{xg}^i , \quad (2.1)$$

sendo  $N_i^m$  a concentração do nuclídeo  $i$  na região  $m$  e  $\sigma_{xg}^i$  a seção de choque microscópica do nuclídeo  $i$  para a reação do tipo  $x$  no grupo  $g$ .

Oberva-se que as seções de choque macroscópicas variarão com o tempo, devido às concentrações isotópicas. Conhecer quais são as variações que sofrem as concentrações isotópicas ao longo do ciclo de operação do reator é o chamado cálculo de depleção. Então, as equações que descrevem as mudanças das concentrações dos nuclídeos, no núcleo do reator, são chamadas de equações de depleção, e podem ser derivadas usando idéias simples de balanço. Por exemplo, se  $N_i(t)$  é a concentração que caracteriza um nuclídeo  $i$  no instante de tempo  $t$ , então um esquema que ilustra a produção e a perda do nuclídeo [10] é mostrado na figura 2.2.

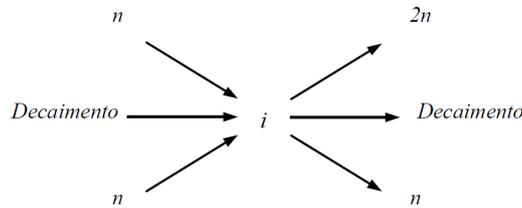


Figura 2.2: Reações contidas na depleção isotópica

Uma equação geral caracterizando este balanço, pode ter a seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} N_i^m(t) = \text{Taxa de Ganho} - \text{Taxa de Perda} \quad (2.2)$$

onde a ‘Taxa de Ganho’ contabiliza as reações que outros núclídeos experimentam para formar o núclídeo  $i$  e a ‘Taxa de Perda’ contabiliza as reações que o núclídeo  $i$  sofre para se transformar em outro núclídeo. Além disso, existem reações de ‘feedback’ que se serão levadas em conta em nosso estudo. Esta dissertação considera como tema essencial o cálculo de transmutação dos AM, através da solução das equações de depleção que governam as variações nas concentrações dos núclídeos com o tempo. Elas formam um sistema de equações diferenciais de primeira ordem, que pode ser formalmente resolvido pelo cálculo da exponencial da matriz de depleção.

## 2.2 Cadeias de Depleção

As cadeias de depleção que serão usadas nesta dissertação são mostradas nas figuras 2.3 e 2.4. A primeira figura mostra a cadeia de depleção dos Actinídeos, a qual valerá apenas na região do combustível. A cadeia dos AM, que valerá apenas na região de transmutação, é idêntica àquela mostrada na figura 2.3, mas com a exclusão do U238 e do Np239. Podemos observar que nestas cadeias estão presentes quatro tipos de reações, que são as reações de fissão e de captura, além de decaimento  $\beta$  e  $\gamma$ . Além destas reações o decaimento  $\alpha$  e a reação N2n representam as reações de realimentação (ou ‘feedback’). Com o uso destas cadeias tem-se um total de 21 núclídeos (17 actinídeos e 4 PF) nas regiões de combustível, além de um veneno queimável. Já para as regiões de transmutação, aquelas que contêm os AM, tem-se 19 núclídeos (15 actinídeos e 4 PF) na cadeia de depleção. A segunda figura mostra a cadeia dos PF, onde estão presentes as reações de fissão e captura e também o decaimento  $\beta$ . Cabe dizer que são considerados 4 PF no total. Há núclídeos que não foram considerados na cadeia de depleção por ter uma meia-vida curta vida (horas ou minutos). Assim, no lugar destes núclídeos estão as caixas vazias observadas na figura 2.3.

## 2.3 Matriz de Depleção

Com base na equação (2.2) e nas cadeias apresentadas na seção 2.2, pode-se escrever as equações de depleção, para os Actinídeos, da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}N_i^m(t) = \sum_{j=1}^{I_f} e_{ij}^m(t)N_j^m(t) ; \quad i = 1, I_f \quad (2.3)$$

onde  $I_f$  indica o número total de Actinídeos e  $e_{ij}^m(t)$  representa os elementos da matriz de depleção, no  $t$ , que são dados por:

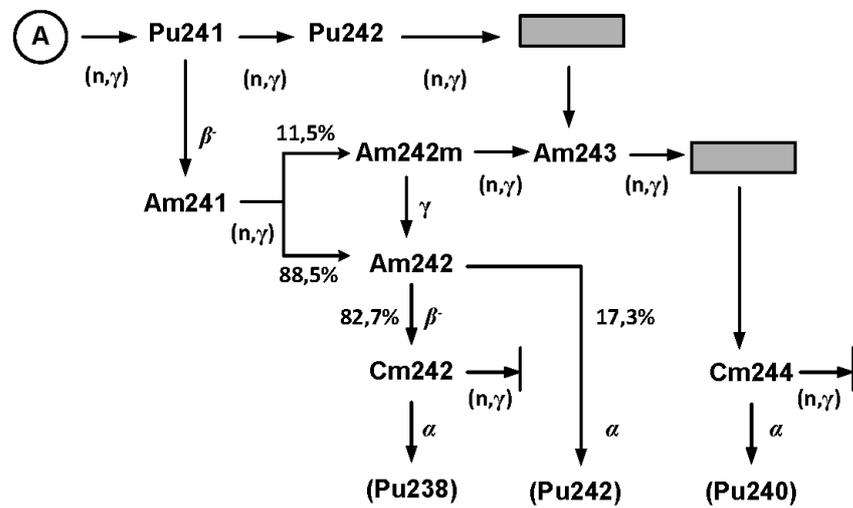
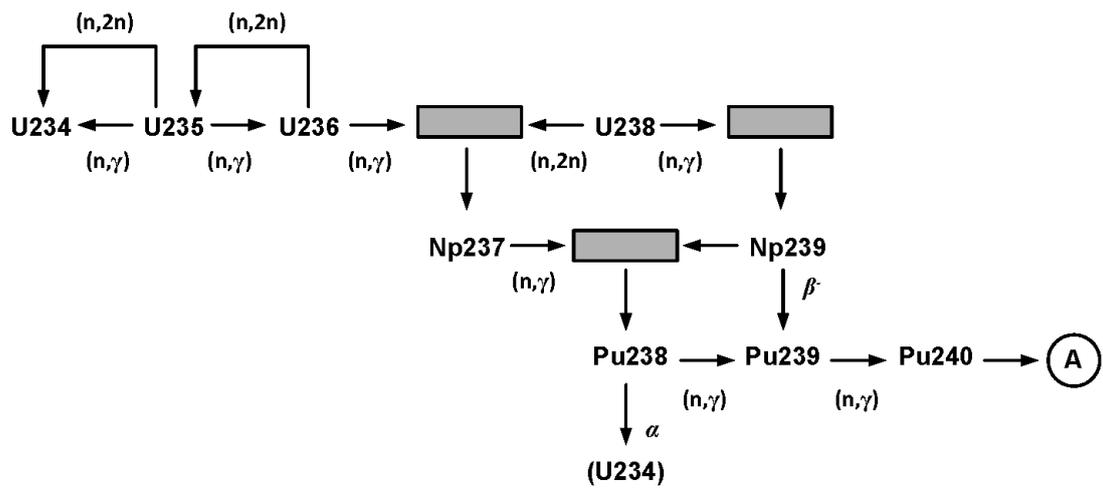


Figura 2.3: Cadeia de depleção dos Actinídeos.

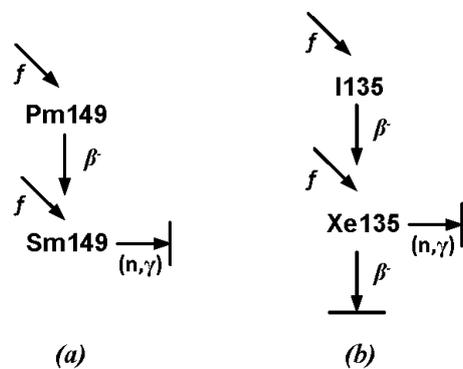


Figura 2.4: Cadeias de depleção do Samário (a) e Xenônio (b)

$$e_{ii}^m(t) = - \left( \lambda_i + \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^i \bar{\varphi}_g^m(t) + \sigma_{N,2n}^i \bar{\varphi}_1^m(t) \right) , \quad (2.4)$$

$$e_{ij}^m(t) = \alpha_i^j \lambda_j \quad \text{ou} \quad \alpha_i^j \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^i \bar{\varphi}_g^m(t) ; \quad j < i \quad (2.5)$$

e

$$e_{ij}^m(t) = \lambda_j \quad \text{ou} \quad \sigma_{N,2n}^i \bar{\varphi}_1^m(t) ; \quad j > i . \quad (2.6)$$

Sendo  $\lambda$  a representação da constante de decaimento ( $\alpha$ ,  $\beta$  ou  $\gamma$ ), do isótopo  $j$ ,  $\bar{\varphi}_g^m$  é o fluxo de nêutrons médio da região  $m$  no grupo  $g$ , normalizado à potência de operação, no intervalo de queima  $\Delta t_l$ . A constante  $\alpha_i^j$  é a fração de produção do nuclídeo  $i$  por decaimento ou por captura neutrônica do nuclídeo  $j$ .

Para os PF as equações de depleção são dados por:

$$\frac{d}{dt} N_i^m(t) = \sum_{j=1}^{I_f} \epsilon_{ij}^m(t) N_j^m(t) + \sum_{j=I_f+1}^I e_{ij}^m(t) N_j^m(t) ; \quad i = I_f + 1, I \quad (2.7)$$

onde  $I$  é o número total de nuclídeos ( $I_f$  mais 4 PF) e  $e_{ij}^m(t)$ , neste caso, são dados por:

$$\epsilon_{ii}^m(t) = \gamma_i^j \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\varphi}_g^m(t) ; \quad j < i , \quad (2.8)$$

$$e_{ii}^m(t) = - \left( \lambda_i + \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^i \bar{\varphi}_g^m(t) \right) \quad (2.9)$$

e

$$e_{ij}^m(t) = \lambda_j ; \quad j < i , \quad (2.10)$$

sendo  $\gamma_i^j$  a fração de fissão do actínídeo  $j$  que produz o produto de fissão  $i$ .

Para o veneno queimável (VQ), tem-se que

$$\frac{d}{dt} N_i^m(t) = - \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^i \bar{\varphi}_g^m(t) N_j^m(t) ; \quad i = I + 1 . \quad (2.11)$$

Nota-se que todos os elementos da matriz de depleção e da equação para o VQ, são dependentes do fluxo de nêutrons médio na região de cálculo.

## 2.4 Aproximação Quase-estática

O ciclo de operação do reator (ou intervalo de queima)  $[t_0, t_L]$  é dividido em  $L$  intervalos de tempo  $[t_{l-1}, t_l)$ , como é ilustrado na figura 2.5.

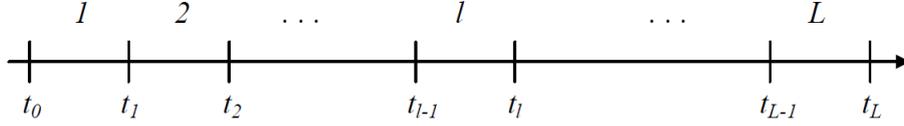


Figura 2.5: Discretização temporal do ciclo de operação do reator

Com a finalidade de determinar  $\bar{\varphi}_g^m(t)$ ; para  $t \in [t_{l-1}, t_l)$ , fazemos uso da chamada aproximação quase-estática. Nela o fluxo de nêutrons é assumido constante em um intervalo de tempo. Assim, podemos assumir que o fluxo de nêutrons médio por região é constante em um intervalo de tempo [9] e isto pode ser traduzido da seguinte forma:

$$\bar{\varphi}_g^m(t) \cong \bar{\varphi}_g^m(t_{l-1}) ; \quad t_{l-1} \leq t < t_l . \quad (2.12)$$

No próximo capítulo será desenvolvido um método de solução da equação de difusão para a obtenção deste fluxo, uma vez conhecidas em  $t_{l-1}$  as concentrações isotópicas.

## 2.5 Matriz de Transição

Uma vez adotada a aproximação quase-estática para o fluxo de nêutrons médio na região  $m$ , o sistema de equações de depleção isotópica, dado pelas equações (2.3) e (2.7), as quais governam as concentrações dos nuclídeos, podem ser escritas, de modo conveniente, em notação matricial, tal como segue:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{N}^m(t) = E_l^m \mathbf{N}^m(t) ; \quad t_{l-1} \leq t < t_l , \quad (2.13)$$

onde:

$$\mathbf{N}^m(t) \equiv \begin{bmatrix} N_1(t) \\ N_2(t) \\ \vdots \\ N_I(t) \end{bmatrix}$$

e

$$E_i^m \equiv \begin{bmatrix} e_{11}^m(t_{l-1}) & e_{12}^m(t_{l-1}) & \cdots & e_{1I}^m(t_{l-1}) \\ e_{21}^m(t_{l-1}) & e_{22}^m(t_{l-1}) & \cdots & e_{2I}^m(t_{l-1}) \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ e_{I1}^m(t_{l-1}) & e_{I2}^m(t_{l-1}) & \cdots & e_{II}^m(t_{l-1}) \end{bmatrix}$$

com  $\mathbf{N}^m(t_{l-1})$  conhecido. O vetor solução da equação (2.13),  $\mathbf{N}^m(t_l)$ , pode ser obtido através de um procedimento numérico baseado na exponencial da matriz de depleção, ou seja,

$$\mathbf{N}^m(t_l) = e^{E_i^m \Delta t_l} \mathbf{N}^m(t_{l-1}) , \quad (2.14)$$

onde  $\Delta t_l = t_l - t_{l-1}$ . O cálculo da matriz  $e^{E_i^m \Delta t_l}$  é feito através do método de matriz de transição. O procedimento completo, com maiores detalhes pode-ser encontrado na referência [11]. Com isso, finalmente, é possível calcular as concentrações dos Actinídeos (região do combustível), dos AM e dos PF no instante desejado.

# Capítulo 3

## Cálculo Neutrônico

### 3.1 Equação da Continuidade de Nêutrons

Um evento de fissão em um sistema subcrítico com uma fonte de nêutrons é causado por dois tipos de nêutrons, nêutrons provenientes dos eventos de fissão e os nêutrons que vem da fonte externa [12]. Assim, a equação da continuidade de nêutrons e a Lei de Fick, ambas particularizadas para o caso unidimensional, dois grupos e no instante  $t_l$  e que podem ser, respectivamente, escritas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} J_g(x, t_l) + \Sigma_{Rg}(x, t_l) \phi_g(x, t_l) = \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}(x, t_l) \phi_{g'}(x, t_l) + \\ + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \Sigma_{gg'}(x, t_l) \phi_{g'}(x, t_l) + S_g(x, t_l) ; l=1, \dots, L \end{aligned} \quad (3.1)$$

e

$$J_g(x, t_l) = -D_g(x, t_l) \frac{d\phi_g}{dx}(x, t_l) ; \quad g = 1, 2 , \quad (3.2)$$

onde  $J_g(x, t_l)$  é a corrente líquida de nêutrons do grupo  $g$ ;  $\Sigma_{Rg}(x, t_l)$  é a seção de choque macroscópica de remoção do grupo  $g$ ;  $\chi_g$  é o espectro de fissão do grupo  $g$ ;  $\nu \Sigma_{fg'}(x, t_l)$  é o produto do número médio de nêutrons emitidos na fissão pela seção de choque macroscópica de fissão do grupo  $g'$ ;  $\Sigma_{gg'}(x, t_l)$  é a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo  $g'$  para o grupo  $g$ ;  $S_g(x, t_l)$  é a fonte externa de nêutrons do grupo  $g$ ;  $\phi_g(x, t_l)$  é o fluxo de nêutrons do grupo  $g$  e  $D_g(x, t_l)$  é o coeficiente de difusão do grupo  $g$ .

Além disso, a seção de choque macroscópica de espalhamento é representada por:

$$\Sigma_{gg'}(x, t_l) \equiv \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(x, t_l), \quad (3.3)$$

Cabe aqui dizer que nesta dissertação só será considerado down-scattering para

efetuar os cálculos. E a seção de choque macroscópica de remoção é definida como segue:

$$\Sigma_{Rg}(x, t_l) \equiv \Sigma_{ag}(x, t_l) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \Sigma_{gg'}(x, t_l), \quad (3.4)$$

sendo  $\Sigma_{ag}(x, t_l)$  a seção de choque macroscópica de absorção. A partir da seguinte seção, por comodidade, optou-se por omitir a variável  $t_l$ .

## 3.2 Método de Diferenças Finitas

No intuito de resolver as equações (3.1) e (3.2), para obter o fluxo de nêutrons em cada instante  $t_l$ , este trabalho utiliza como ferramenta de cálculo o Método de Diferenças Finitas. No desenvolvimento é usado o esquema centrado na malha, que divide o reator em pequenas partições arbitrárias, mas que são uniformes em cada região [13]. Uma representação pode ser vista na figura 3.1.

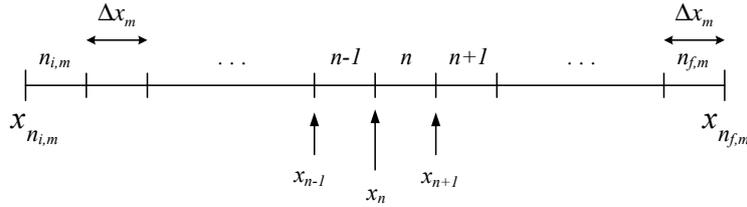


Figura 3.1: Divisão da região  $m$  em malhas.

Algumas observações de utilidade no progresso do método são dadas:

1. A malha  $n$  está associada ao ponto  $x_n$ .
2.  $n_{i,m}$  e  $n_{f,m}$  representam as malhas inicial e final da região  $m$ , respectivamente.
3. O tamanho de cada partição (ou malha) da região  $m$ , vem da divisão do tamanho da região pelo número de partições, assim

$$\Delta x_m = (x_{f,m} - x_{i,m}) / \text{Número de Partições}$$

Então, integrando a equação (3.1) em  $x_n \leq x \leq x_{n+1}$  obtém-se:

$$J_g(x_{n+1}) - J_g(x_n) + \Sigma_{Rg}^m \bar{\phi}_g^n \Delta x_m = \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}^m \bar{\phi}_{g'}^n \Delta x_m + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \Sigma_{gg'}^m \bar{\phi}_g^n \Delta x_m + S_g^n \Delta x_m \quad (3.5)$$

onde, segundo a equação (3.2):

$$J_g(x_n) = -D_g(x_n) \left. \frac{d}{dx} \phi_g(x) \right|_{x=x_n} \quad (3.6)$$

enquanto que o fluxo médio de nêutrons ( $\bar{\phi}_g^n$ ) e a fonte externa ( $S_g^n$ ), são definidos como segue:

$$\bar{\phi}_g^n \equiv \frac{1}{\Delta x_m} \int_{x_n}^{x_{n+1}} \phi_g(x) dx \quad (3.7)$$

e

$$S_g^n \equiv \frac{1}{\Delta x_m} \int_{x_n}^{x_{n+1}} S_g(x) dx \quad (3.8)$$

Ademais, tanto o fluxo de nêutrons quanto a corrente líquida são funções contínuas, e este fato é representado da seguinte maneira:

$$\phi(x_n^+) = \phi(x_n^-) = \phi(x_n) \quad (3.9)$$

e

$$J(x_n^+) = J(x_n^-) = J(x_n) \quad (3.10)$$

onde  $x_n^+$  e  $x_n^-$  podem ser vistos na figura 3.2.

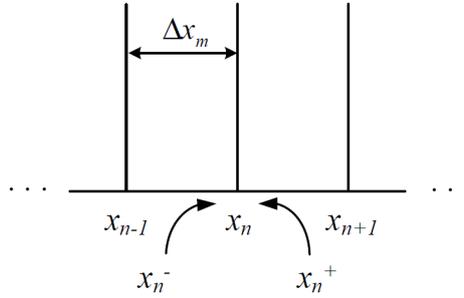


Figura 3.2: Continuidade no ponto  $x_n$

O fato do fluxo de nêutrons e da corrente líquida serem funções contínuas, combinado com a aproximação de diferenças finitas para as derivadas do fluxo, na Lei de Fick, equação (3.2), nos leva às seguintes expressões para as correntes  $J_g(x_{n+1})$  e  $J_g(x_n)$  que aparecem na equação (3.1):

### 1) Ponto no interior de uma região

Para  $n_{i,m} < n < n_{f,m}$ ; com  $m = 1, \dots, M$ , tem-se que

$$J_g(x_n^+) = -D_g(x_n^+) \left. \frac{d}{dx} \phi_g(x) \right|_{x=x_n^+} \cong -2D_g^m \frac{\bar{\phi}_g^n - \phi_g(x_n)}{\Delta x_m} \quad (3.11)$$

e

$$J_g(x_n^-) = -D_g(x_n^-) \left. \frac{d}{dx} \phi_g(x) \right|_{x=x_n^-} \cong -2D_g^m \frac{\phi_g(x_n) - \bar{\phi}_g^{n-1}}{\Delta x_m} . \quad (3.12)$$

Determinadas as correntes à esquerda e à direita, de acordo com as equações (3.9) e (3.10) obtém-se que

$$\phi_g(x_n) = \frac{\bar{\phi}_g^n + \bar{\phi}_g^{n-1}}{2} \quad (3.13)$$

e, conseqüentemente, da equação (3.11) (ou, da equação (3.12)), tem-se que

$$J_g(x_n) = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} (\bar{\phi}_g^n - \bar{\phi}_g^{n-1}) . \quad (3.14)$$

## 2) Ponto de interface a esquerda

Para a malha inicial da região  $m$ , ou seja,  $n = n_{i,m}$ , tem-se que

$$\phi_g(x_n) = \frac{D_g^m \Delta x_{m-1} \bar{\phi}_g^n + D_g^{m-1} \Delta x_m \bar{\phi}_g^{n-1}}{D_g^m \Delta x_{m-1} + D_g^{m-1} \Delta x_m} \quad (3.15)$$

e

$$J_g(x_n) = -\frac{2D_g^m D_g^{m-1}}{D_g^m \Delta x_{m-1} + D_g^{m-1} \Delta x_m} (\bar{\phi}_g^n - \bar{\phi}_g^{n-1}) . \quad (3.16)$$

## 3) No ponto de interface a direita

Para a malha final da região  $m$ , ou seja,  $n = n_{f,m}$ , tem-se que

$$\phi_g(x_{n+1}) = \frac{D_g^{m+1} \Delta x_m \bar{\phi}_g^{n+1} + D_g^m \Delta x_{m+1} \bar{\phi}_g^n}{D_g^{m+1} \Delta x_m + D_g^m \Delta x_{m+1}} \quad (3.17)$$

e

$$J_g(x_{n+1}) = -\frac{2D_g^{m+1} D_g^m}{D_g^{m+1} \Delta x_m + D_g^m \Delta x_{m+1}} (\bar{\phi}_g^{n+1} - \bar{\phi}_g^n) . \quad (3.18)$$

Com a finalidade de encontrar uma expressão que descreva a corrente líquida no pontos de contorno do sistema, quais sejam  $J_g(x_1)$  e  $J_g(x_{N+1})$  correspondentes às malhas inicial e final do sistema, é requerido um tratamento específico que leve em consideração o fluxo e a corrente na superfície do reator. Para isto, são propostas as seguintes condições de contorno:

1. Fluxo nulo no contorno
2. Corrente líquida nula (Condição de simetria)
3. Corrente de entrada nula  $J_g^+(x_1) = 0$  e  $J_g^-(x_{N+1}) = 0$

Essas três condições podem ser resumidas da seguinte forma,

$$\alpha\phi_g(x_s) + \beta \left. \frac{d}{dx}\phi_g(x) \right|_{x=x_s} = 0 \quad (3.19)$$

onde  $x_s$  pode ser  $x_1$  ou  $x_{N+1}$ . Com isso, pode-se escrever:

#### 4) No contorno à esquerda

Para a primeira malha do sistema, ou seja,  $n = 1$

$$\alpha\phi_g(x_1) + \beta \left. \frac{d}{dx}\phi_g(x) \right|_{x=x_1} = \alpha\phi_g(x_1) + \beta \frac{\bar{\phi}_g^1 - \phi_g(x_1)}{\Delta x_1/2} = 0 \quad ,$$

o que resulta em

$$\phi_g(x_1) = \frac{2\beta}{2\beta - \alpha \Delta x_1} \bar{\phi}_g^1 \quad (3.20)$$

e

$$J_g(x_1) = \frac{2\alpha D_g^1}{2\beta - \alpha \Delta x_1} \bar{\phi}_g^1 \quad (3.21)$$

#### 5) No contorno à direita

Para a última malha do sistema, ou seja,  $n = N$

$$\alpha\phi_g(x_{N+1}) + \beta \left. \frac{d}{dx}\phi_g(x) \right|_{x=x_{N+1}} = \alpha\phi_g(x_{N+1}) + \beta \frac{\phi_g(x_{N+1}) - \bar{\phi}_g^N}{\Delta x_M/2} = 0$$

o que resulta em

$$\phi_g(x_{N+1}) = \frac{2\beta}{2\beta + \alpha \Delta x_M} \bar{\phi}_g^N \quad (3.22)$$

e

$$J_g(x_{N+1}) = \frac{2\alpha D_g^M}{2\beta + \alpha \Delta x_M} \bar{\phi}_g^N \quad (3.23)$$

Pode-se observar que  $\alpha$  e  $\beta$  são valores determinantes na formulação das expressões, (3.21) e (3.23), por isso é preciso analisar istos parâmetros nas condições de contorno acima apresentadas, logo

##### i) Fluxo Nulo no contorno

Nesta condição, faz-se  $\alpha=1$  e  $\beta=0$ ,

$$J_g(x_1) = -\frac{2D_g^1}{\Delta x_1} \bar{\phi}_g^1 \quad (3.24)$$

e

$$J_g(x_{N+1}) = -\frac{2D_g^M}{\Delta x_M} \bar{\phi}_g^N \quad (3.25)$$

## ii) Corrente Líquida Nula no contorno

Nesta condição, faz-se  $\alpha=0$  e  $\beta=1$ ,

$$J_g(x_1) = 0 \quad (3.26)$$

e

$$J_g(x_{N+1}) = 0 . \quad (3.27)$$

## iii) Corrente de Entrada Nula no contorno

E, por último, nesta condição utiliza-se a Aproximação da Difusão e a definição das correntes escritas, em função das correntes parciais [9], ou seja,

$$J_g(x_s) = J_g^+(x_s) - J_g^-(x_s) \quad (3.28)$$

e

$$\phi_g(x_s) = 2 (J_g^+(x_s) + J_g^-(x_s)) . \quad (3.29)$$

Assim, partindo da condição de corrente de entrada nula, seja à esquerda ( $s = 1$ ) ou seja à direita ( $s = N + 1$ ), e realizando algumas simples operações com (3.28), (3.29) e a Lei de Fick, equação (3.2), obtém-seno caso da corrente de entrada nula à esquerda, ( $J^+(x_1) = 0$ ):

$$\phi_g(x_1) - 2D_g^1 \left. \frac{d}{dx} \phi_g(x) \right|_{x=x_1} . \quad (3.30)$$

Da equação (3.30) obtém-se que  $\alpha=1$  e  $\beta = -2D_g^1$ , neste caso.

Seguindo o mesmo procedimento, no caso de corrente entrada nula à direita,  $J^-(x_{N+1}) = 0$ :

$$\phi_g(x_{N+1}) + 2D_g^M \left. \frac{d}{dx} \phi_g(x) \right|_{x=x_{N+1}} . \quad (3.31)$$

E, da equação (3.31) obtém-se que  $\alpha=1$  e  $\beta = 2D_g^M$ , neste caso.

No capítulo seguinte será descrito o programa que foi desenvolvido para atingir o objetivo desta dissertação. Mas antes de terminar esta seção, tem que ser dito que essas três condições de contorno (i, ii e iii), foram implementadas no programa, permitindo ao usuário escolher uma dentre as três condições de contorno. Neste estudo, trabalha-se com a condição de contorno de Fluxo Nulo.

### 3.3 Equação de Balanço

Usando as expressões obtidas para  $J_g(x_{n+1})$  e  $J_g(x_n)$  na seção (3.2), a equação (3.1) pode ser escrita:

Para qualquer malha interna, ou seja,  $n_{i,m} < n < n_{f,m}$  tem-se que

$$a_g^{n,n-1} \bar{\phi}_g^{n-1} + a_g^{n,n} \bar{\phi}_g^n + a_g^{n,n+1} \bar{\phi}_g^{n+1} = \sum_{g'=1}^2 f_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 e_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \bar{s}_g^n \quad (3.32)$$

onde:

$$a_g^{n,n-1} = a_g^{n,n+1} = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m},$$

$$a_g^{n,n} = -a_g^{n,n-1} - a_g^{n,n+1} + \Sigma_{Rg}^m \Delta x_m,$$

$$f_{gg'}^n = \chi_g \nu \Sigma_{fg'}^m, \quad e_{gg'}^n = \Sigma_{gg'}^m \Delta x_m$$

e

$$\bar{s}_g^n = s_g^n \Delta x_m.$$

Para malhas no início de uma região  $m$ , ou seja,  $n = n_{i,m}$  tem-se que

$$a_g^{n,n-1} \bar{\phi}_g^{n-1} + a_g^{n,n} \bar{\phi}_g^n + a_g^{n,n+1} \bar{\phi}_g^{n+1} = \sum_{g'=1}^2 f_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 e_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \bar{s}_g^n \quad (3.33)$$

onde:

$$a_g^{n,n-1} = -\frac{2D_g^m D_g^{m-1}}{D_g^m \Delta x_{m-1} + D_g^{m-1} \Delta x_m},$$

$$a_g^{n,n+1} = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m},$$

$$a_g^{n,n} = -a_g^{n,n-1} - a_g^{n,n+1} + \Sigma_{Rg}^m \Delta x_m,$$

$$f_{gg'}^n = \chi_g \nu \Sigma_{fg'}^m, \quad e_{gg'}^n = \Sigma_{gg'}^m \Delta x_m$$

e

$$\bar{s}_g^n = s_g^n \Delta x_m.$$

Para malhas no término de uma região  $m$ , ou seja,  $n = n_{f,m}$  tem-se que

$$a_g^{n,n-1} \bar{\phi}_g^{n-1} + a_g^{n,n} \bar{\phi}_g^n + a_g^{n,n+1} \bar{\phi}_g^{n+1} = \sum_{g'=1}^2 f_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 e_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \bar{s}_g^n \quad (3.34)$$

onde:

$$a_g^{n,n-1} = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m},$$

$$a_g^{n,n+1} = -\frac{2D_g^{m+1} D_g^m}{D_g^{m+1} \Delta x_m + D_g^m \Delta x_{m+1}},$$

$$a_g^{n,n} = -a_g^{n,n-1} - a_g^{n,n+1} + \Sigma_{Rg}^m \Delta x_m,$$

$$f_{gg'}^n = \chi_g \nu \Sigma_{fg'}^m, \quad e_{gg'}^n = \Sigma_{gg'}^m \Delta x_m$$

e

$$\bar{s}_g^n = s_g^n \Delta x_m.$$

Para o contorno à esquerda, ou seja, para  $n = 1$ , da equação (3.1) tem-se que

$$a_g^{1,1} \bar{\phi}_g^1 + a_g^{1,2} \bar{\phi}_g^2 = \sum_{g'=1}^2 f_{gg'}^1 \bar{\phi}_{g'}^1 + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 e_{gg'}^1 \bar{\phi}_{g'}^1 + \bar{s}_g^1 \quad (3.35)$$

onde:

$$a_g^{1,2} = -\frac{D_g^1}{\Delta x_1},$$

$$a_g^{1,1} = -a_g^{1,2} - \frac{2\alpha D_g^1}{2\beta - \alpha \Delta x_1} + \Sigma_{Rg}^1 \Delta x_1,$$

$$f_{gg'}^1 = \chi_g \nu \Sigma_{fg'}^1, \quad e_{gg'}^1 = \Sigma_{gg'}^1 \Delta x_1$$

e

$$\bar{s}_g^1 = s_g^1 \Delta x_1.$$

E, finalmente, para o contorno à direita, ou seja, para  $n = N$ , tem-se da equação (3.1), que

$$a_g^{N,N-1} \bar{\phi}_g^{N-1} + a_g^{N,N} \bar{\phi}_g^N = \sum_{g'=1}^2 f_{gg'}^N \bar{\phi}_{g'}^N + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 e_{gg'}^N \bar{\phi}_{g'}^N + \bar{s}_g^N + \bar{s}_g^N \quad (3.36)$$

onde:

$$a_g^{N,N-1} = -\frac{D_g^M}{\Delta x_M},$$

$$a_g^{N,N} = -a_g^{N,N-1} + \frac{2\alpha D_g^M}{2\beta - \alpha \Delta x_M} + \Sigma_{Rg}^M \Delta x_M,$$

$$f_{gg'}^N = \chi_g \nu \Sigma_{fg'}^M, \quad e_{gg'}^N = \Sigma_{gg'}^M \Delta x_M$$

e

$$\bar{s}_g^N = s_g^N \Delta x_M.$$

Assim, as equações (3.32), (3.33), (3.34), (3.35) e (3.36) conduzem a um sistema de equações lineares e algébricas, que podem ser resolvidas, por diferentes métodos já conhecidos na literatura [14]. Na próxima seção é apresentado o método de solução, deste sistema de equações, usado nesta dissertação.

### 3.4 Matrizes de Discretização

As equações (3.32), (3.33), (3.34), (3.35) e (3.36), contabilizando todas as  $N$  malhas, nos levam a um sistema de equações que pode ser escrito da seguinte forma matricial:

$$A\Phi = F\Phi + E\Phi + \mathbf{s} \quad (3.37)$$

sendo  $\Phi$  e  $\mathbf{s}$  são o fluxo médio de nêutrons e a fonte externa, escritos como a seguir:

$$\Phi \equiv \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{s} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{s}_1 \\ \mathbf{s}_2 \end{bmatrix}$$

onde:

$$\Phi_g \equiv \begin{bmatrix} \bar{\phi}_g^1 \\ \bar{\phi}_g^2 \\ \bar{\phi}_g^3 \\ \vdots \\ \bar{\phi}_g^N \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{s}_g \equiv \begin{bmatrix} \bar{s}_g^1 \\ \bar{s}_g^2 \\ \bar{s}_g^3 \\ \vdots \\ \bar{s}_g^N \end{bmatrix}; \quad \text{com } g = 1, 2.$$

Além disso, as matrizes  $A$ ,  $F$  e  $E$ , são assim definidas:

$$A \equiv \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{bmatrix}; \quad F \equiv \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} \\ F_{21} & F_{22} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad E \equiv \begin{bmatrix} 0 & E_{12} \\ E_{21} & 0 \end{bmatrix}.$$

com



$A_g$  ( $g = 1, 2$ ), um processo iterativo é usado para calcular o fluxo, conforme observa-se das equações (3.38) e (3.39). O método iterativo utilizado neste trabalho, inicia-se com um valor arbitrário e conhecido de  $\bar{\phi}_g^{n(0)}$  e iterações são realizadas até atingir a convergência, com um teste de convergência, que garanta a solução do problema, da seguinte forma:

$$\max_{n,g} \left| \frac{\bar{\phi}_g^{n(i+1)} - \bar{\phi}_g^{n(i)}}{\bar{\phi}_g^{n(i)}} \right| \leq \epsilon_\phi \quad (3.40)$$

com  $\epsilon_\phi$  da ordem de  $10^{-03}$ .

### 3.5 Fluxo Médio por Região

Uma vez calculado o fluxo médio de nêutrons por malha  $\bar{\phi}_g^n$ , pode-se obter os fluxos médios em cada região, pois é este valor que comparece nos elementos da matriz de depleção. Então, para obter o fluxo médio por região, fazem-se algumas manipulações matemáticas que reunirão todas as malhas de uma região. Para isto, faz-se uso da equação (3.7), ou seja,

$$\begin{aligned} \bar{\phi}_g^m(t_l) &\equiv \frac{1}{x_{n_{f,m}} - x_{n_{i,m}}} \int_{x_{n_{i,m}}}^{x_{n_{f,m}}} \phi_g(x, t_l) dx \\ &\equiv \frac{1}{x_{n_{f,m}} - x_{n_{i,m}}} \sum_{n=n_{i,m}}^{n_{f,m}} \int_{x_n}^{x_{n+1}} \phi_g(x, t_l) dx \\ &\equiv \frac{1}{x_{n_{f,m}} - x_{n_{i,m}}} \sum_{n=n_{i,m}}^{n_{f,m}} \bar{\phi}_g^n(t_l) \Delta x_m . \end{aligned} \quad (3.41)$$

# Capítulo 4

## Programa de Cálculo

Na implementação de um método iterativo de cálculo do fluxo de nêutrons, utilizado nos cálculos de transmutação dos núclídeos de AM, foram elaborados três módulos em linguagem FORTRAN. O primeiro, chamado ‘Problema de Fonte Fixa’, resolve a equação de difusão de nêutrons com fonte externa. O segundo, chamado ‘Cálculo de Depleção’. Neste módulo se realiza o procedimento do cálculo das concentrações isotópicas. E, finalmente, o terceiro módulo, é ‘Problema de Autovalor’, este é o encarregado de calcular o fator de multiplicação efetivo. O programa principal ”Cálculo de Transmutação”, descreve o processo evolutivo que se encarregará de calcular as concentrações dos AM a cada intervalo de tempo. No programa, como nos módulos, são mostradas sub-routines cujo nome definem suas funções.

### 4.1 Módulo Problema de Fonte Fixa

O módulo ”Problema de Fonte Fixa” é o encarregado de obter o fluxo de nêutrons para o cálculo de transmutação. Esse módulo utiliza o método do Algoritmo de Thomas para inverter a matriz de discretização. Aqui faz-se uso de um Método iterativo e um teste de convergência, para assim obter o fluxo de nêutrons. Um fluxograma descrevendo esse módulo é visto na figura 4.1.

### 4.2 Módulo Cálculo de Depleção

O módulo ”Cálculo de Depleção” realiza o cálculo das concentrações isotópicas. Nesse módulo se monta a matriz de depleção, com os elementos calculados no primeiro capítulo. Como se viu lá, eles dependem do fluxo médio de nêutrons por região e este fluxo médio por região foi calculado em uma sub-routine separada, que liga este módulo com o módulo anterior. Uma vez montada a matriz de depleção, se calcula a matriz de transição, a qual se encarrega de encontrar as concentrações isotópicas

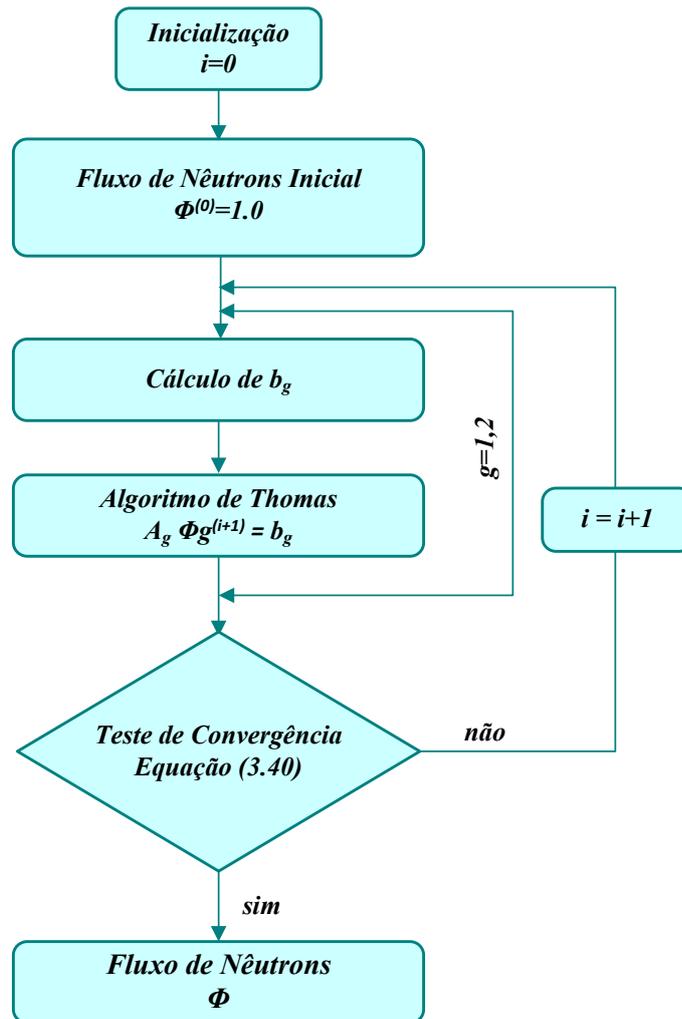


Figura 4.1: Fluxograma do problema de fonte fixa

no instante de tempo seguinte, ver a figura 4.2.

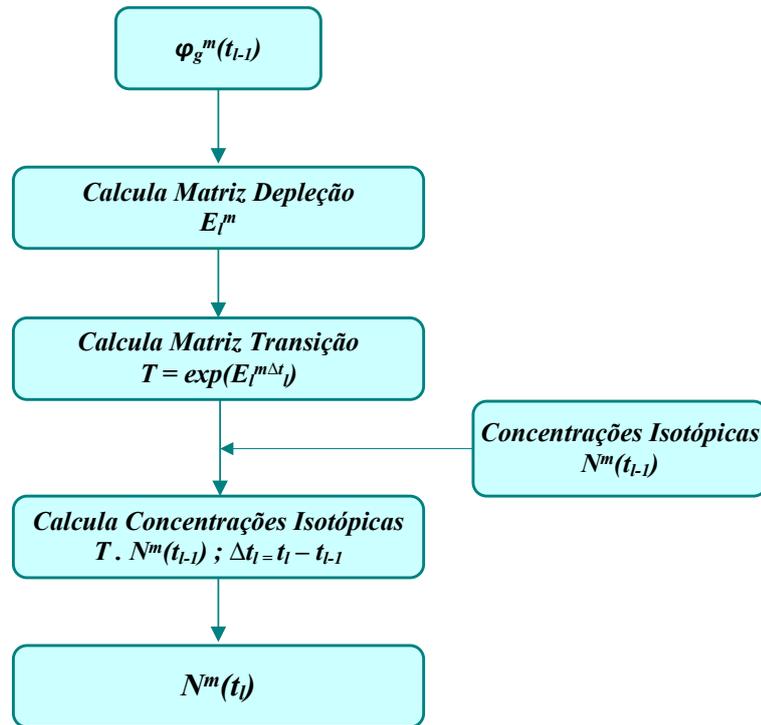


Figura 4.2: Fluxograma do cálculo de depleção

### 4.3 Programa Cálculo de Transmutação

Descritas as funções dos principais módulos, continua-se com a descrição do programa principal cálculo de transmutação. Como o próprio nome do programa diz, ele se encarregará do cálculo de transmutação dos AM. Essa tarefa é feita mediante o recálculo, em cada instante de tempo, dos parâmetros nucleares, dos fluxos médios por região e o cálculo das mudanças nas concentrações. Este programa é baseado em um processo evolutivo, que iniciará com valores conhecidos das concentrações, do fluxo médio, e a leitura dos dados nucleares, e subsequentemente recalculará, nas sub-routines antes mencionada. Para se ter uma clara idéia do programa, ver a figura 4.3. O reator adotado nos cálculos não possui um mecanismo de bancos de controle e é mantida uma fonte constante ao largo de todo intervalo de queima, além de no processo de incineração dos AM, serem criados materiais fissíveis, tais como isótopos do Plutônio. Portanto, tem que se ter um controle da subcriticalidade do sistema para o qual é integrado o seguinte módulo.

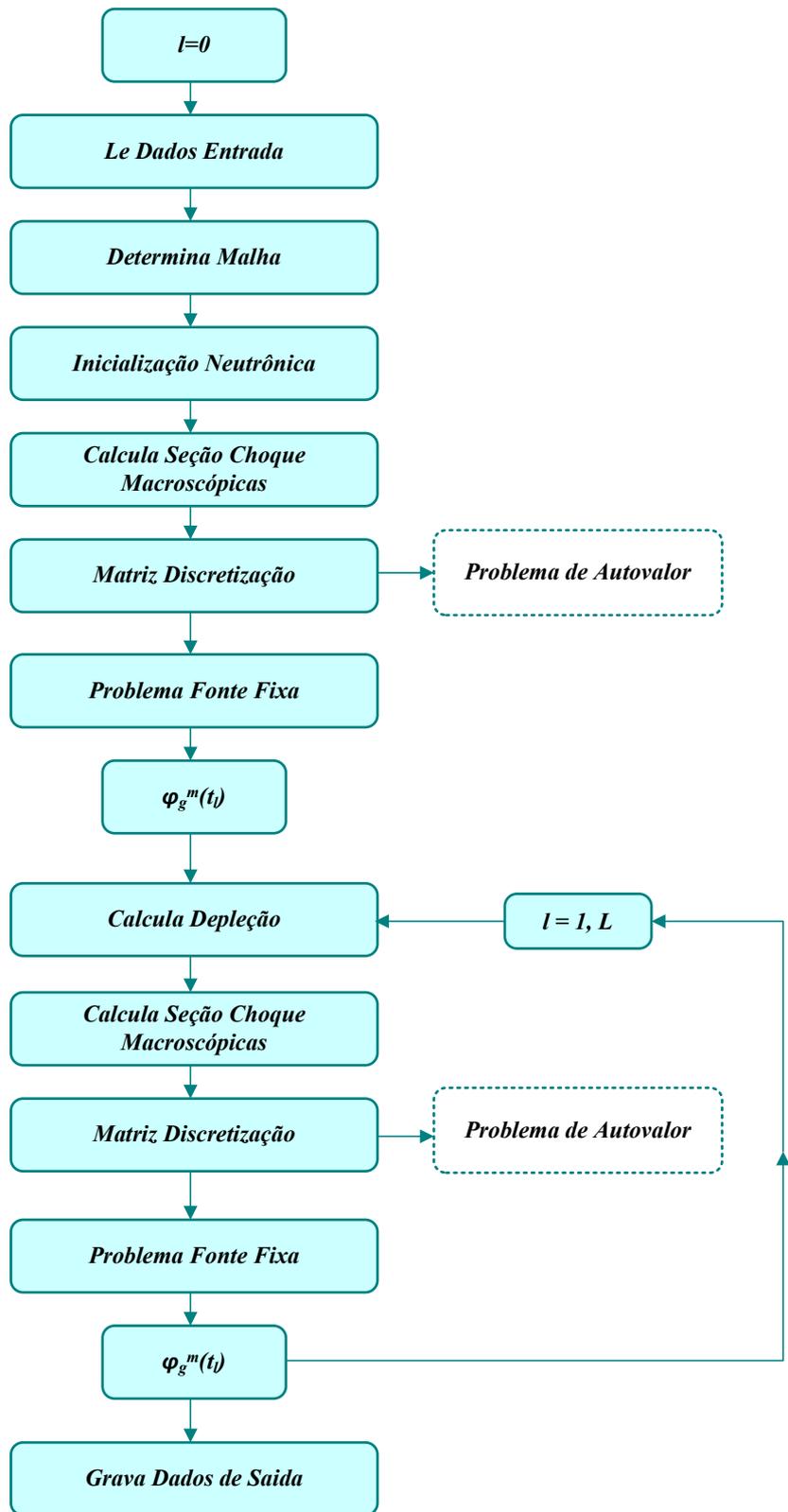


Figura 4.3: Fluxograma do cálculo de transmutação

## 4.4 Módulo Problema de Autovalor

O módulo ‘Problema de Autovalor’ é utilizado só para conhecer a subcriticalidade do reator. As interações externas são encarregadas de encontrar o fator de multiplicação efetivo. É de grande importância, neste caso, conhecer a evolução do  $k_{eff}$  no tempo, devido ao fato que o reator é alimentado por uma fonte fixa ao longo do tempo e, por exemplo, Plutônio é produzido. Um fluxograma descrevendo esse módulo é visto na figura 4.4. Repare que o fluxo de nêutrons calculado nesse módulo não é usado para nenhum outro fim e que somente o cálculo de  $k_{eff}$  é de interesse.

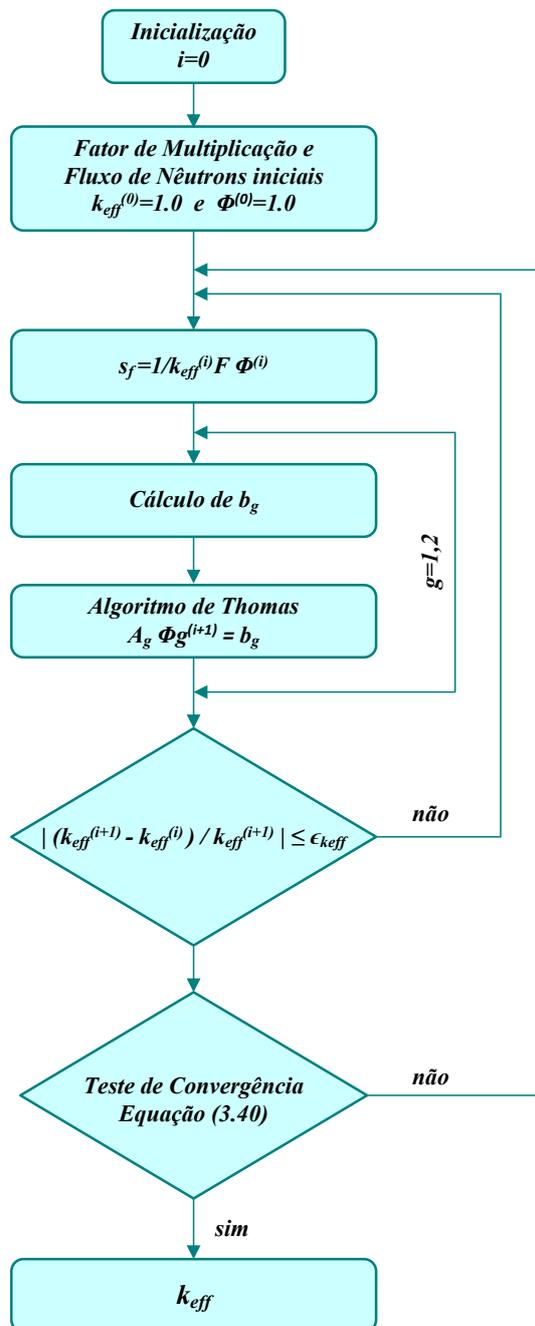


Figura 4.4: Fluxograma do problema de autovalor

No caso do Problema de Autovalor,  $\mathbf{b}_g$  é assim definido:

$$\mathbf{b}_g \equiv \begin{cases} \mathbf{s}_{f1} + E_{12}\Phi_2^{(i)} & ; g = 1 \\ \mathbf{s}_{f2} + E_{21}\Phi_1^{(i+1)} & ; g = 2 \end{cases} \quad (4.1)$$

com

$$\mathbf{s}_{fg} \equiv \frac{1}{k_{eff}^{(i)}}(F_{g1}\Phi_1^{(i)} + F_{g2}\Phi_2^{(i)}) \quad (4.2)$$

Observa-se que nesta dissertação trabalha-se com uma fonte externa de intensidade constante, além das reações de realimentação (ou ‘feedback’). Estes dois fatores farão o fator de multiplicação, ( $k_{eff}$ ) aumentar. E para verificar isto, um cálculo de  $k_{eff}$ , através de um ‘Problema de Autovalor’ é feito. Por isso, que incluiu-se no programa principal o módulo ‘Problema de Autovalor’.

# Capítulo 5

## Análise de Resultados

Neste capítulo, mostramos o núcleo, que foi utilizado nos cálculos, sua composição, suas dimensões e as condições de contorno, como também os dados nucleares usados. Além disso, são apresentados os resultados obtidos com o programa Cálculo de Transmutação.

### 5.1 Apresentação dos dados

Nesse estudo, trabalha-se com um modelo nuclear unidimensional, cujo núcleo é heterogêneo e composto de 9 regiões, como pode-se ver na figura 5.1, foi utilizado. A região do combustível é formada por actínídeos, a região de transmutação é formada pelos AM, e a região central contém a fonte externa de nêutrons. Além disso, há duas regiões externas de refletores. As regiões antes mencionadas possuem as seguintes dimensões, respectivamente 40cm, 20cm, 10cm, e 20cm. A região do refletor consta

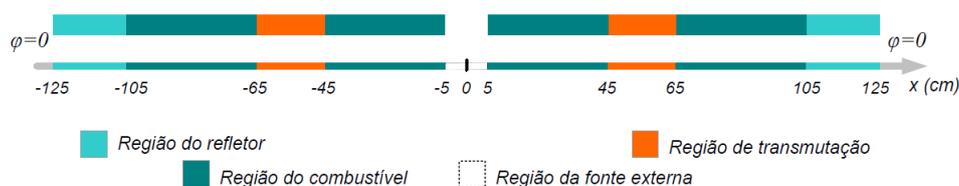


Figura 5.1: Esquema do modelo nuclear.

de água e material estrutural (STRM) e os seus dados nucleares são mostrados na tabela 5.1. A região do combustível consta inicialmente dos núclídeos U234, U235, U238 e B10 (VQ), cujas concentrações isotópicas iniciais estão na tabela 5.2. Tem-se 21 núclídeos (além do VQ que não é contado na cadeia) que descrevem a cadeia de decaimento transmutação do Urânio, cujas constantes de decaimentos e seções de choques microscópicas, a serem usados no cálculo, são mostrados nas tabelas 5.3 e 5.4.

Tabela 5.1: Dados Nucleares do Refletor

| Material | Concentração<br>( <i>atomos/barn.cm</i> ) | $\sigma_s^{1 \rightarrow 2}$<br>( <i>barn</i> ) | $g$ | $\sigma_{cg}$<br>( <i>barn</i> ) | $\sigma_{trg}$<br>( <i>barn</i> ) |
|----------|---|---|-----|----------------------------------|-----------------------------------|
| Água     | 0,133452E-01                              | 0,118437E+01                                    | 1   | 0,118614E-01                     | 0,182095E+02                      |
|          |   |   | 2   | 0,378485E+00                     | 0.602970E+02                      |
| STRM     | 0.100000E+01                              | 0,196343E-03                                    | 1   | 0,271398E-03                     |                                   |
|          |   |   | 2   | 0,103122E-02                     |                                   |

Tabela 5.2: Concentração inicial dos actínídeos na região do combustível.

| Nuclídeo | Índice | Concentração Inicial<br>( <i>atomos/barn.cm</i> ) |
|----------|--------|---|
| U234     | 1      | 0,126020E-05                                      |
| U235     | 2      | 0,152537E-03                                      |
| U238     | 4      | 0,702007E-02                                      |
| B10      | 22     | 0,147846E-04                                      |

Tabela 5.3: Dados Nucleares dos nuclídeos.

| Nuclídeo | Índice | $\lambda$<br>( $s^{-1}$ ) | $\sigma_{N,2n}$<br>( <i>barn</i> ) | $\sigma_s^{1 \rightarrow 2}$<br>( <i>barn</i> ) |
|----------|--------|---------------------------|------------------------------------|---|
| U234     | 1      | -                         | -                                  | 0,239508E-02                                    |
| U235     | 2      | -                         | -                                  | 0,313969E-02                                    |
| U236     | 3      | -                         | 3,1846659E-03                      | 0,193505E-02                                    |
| U238     | 4      | -                         | 6,1297184E-03                      | 0,206684E-02                                    |
| Np237    | 5      | -                         | -                                  | -   |
| Pu238    | 6      | 0,2503E-09                | -                                  | 0,338794E-02                                    |
| Np239    | 7      | 0,3408E-05                | -                                  | -   |
| Pu239    | 8      | -                         | -                                  | 0,247503E-02                                    |
| Pu240    | 9      | -                         | -                                  | 0,653193E-03                                    |
| Pu241    | 10     | 0,1494E-08                | -                                  | 0,262850E-02                                    |
| Am241    | 11     | -                         | -                                  | 0,378865E-02                                    |
| A242m    | 12     | 0,1445E-09                | -                                  | 0,267449E-02                                    |
| Am242    | 13     | 0,1203E-04                | -                                  | -   |
| Pu242    | 14     | -                         | -                                  | 0,152298E-02                                    |
| Am243    | 15     | -                         | -                                  | -   |
| Cm242    | 16     | 0,4925E-07                | -                                  | 0,228482E-02                                    |
| Cm244    | 17     | 0,1213E-08                | -                                  | -   |
| I135     | 18     | 0,2913E-04                | -                                  | -   |
| Xe135    | 19     | 0,2118E-04                | -                                  | -   |
| Pm149    | 20     | 0,3627E-05                | -                                  | -   |
| Sm149    | 21     | -                         | -                                  | -   |
| B10      | 22     | -                         | -                                  | 0,953950E-02                                    |

Tabela 5.4: Seções de choque microscópicas.

| Cadeia | g | $\nu\sigma_{fg}$<br>( <i>barn</i> ) | $\sigma_{fg}$<br>( <i>barn</i> ) | $\sigma_{cg}$<br>( <i>barn</i> ) | $\omega_g$<br>( <i>Joule</i> ) |
|--------|---|-------------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|--------------------------------|
| 1      | 1 | 0,148682E+01                        | 0,566605E+00                     | 0,184693E+02                     | 3,2587700E-11                  |
|        | 2 | 0,514448E+00                        | 0,218728E+00                     | 0,490885E+02                     | 3,2587700E-11                  |
| 2      | 1 | 0,207452E+02                        | 0,847703E+01                     | 0,379149E+01                     | 3,2587700E-11                  |
|        | 2 | 0,663055E+03                        | 0,272112E+03                     | 0,466859E+02                     | 3,2464399E-11                  |
| 3      | 1 | 0,883709E+00                        | 0,346561E+00                     | 0,877102E+01                     | 3,2864898E-11                  |
|        | 2 | 0,5667860E-01                       | 0,2446200E-01                    | 0,263981E+01                     | 3,2587700E-11                  |
| 4      | 1 | 0,323430E+00                        | 0,116086E+00                     | 0,815563E+00                     | 3,3476801E-11                  |
|        | 2 | 0,3363230E-04                       | 0,1349560E-04                    | 0,137578E+01                     | 3,2587700E-11                  |
| 5      | 1 | 0,172221E+01                        | 0,582883E+00                     | 0,169043E+02                     | 3,2671001E-11                  |
|        | 2 | 0,2453220E-01                       | 0,9307270E-02                    | 0,135725E+03                     | 3,2587700E-11                  |
| 6      | 1 | 0,526204E+01                        | 0,172715E+01                     | 0,484273E+01                     | 0,000E+00                      |
|        | 2 | 0,192291E+02                        | 0,664218E+01                     | 0,218858E+03                     | 0,000E+00                      |
| 7      | 1 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
|        | 2 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
| 8      | 1 | 0,267070E+02                        | 0,923134E+01                     | 0,544562E+01                     | 3,4005500E-11                  |
|        | 2 | 0,208987E+04                        | 0,728951E+03                     | 0,404398E+03                     | 3,3874199E-11                  |
| 9      | 1 | 0,208910E+01                        | 0,676660E+00                     | 0,226074E+03                     | 3,3837301E-11                  |
|        | 2 | 0,110680E+00                        | 0,3948630E-01                    | 0,181564E+03                     | 3,2587700E-11                  |
| 10     | 1 | 0,493534E+02                        | 0,167068E+02                     | 0,524341E+01                     | 3,4345200E-11                  |
|        | 2 | 0,212782E+04                        | 0,722447E+03                     | 0,253379E+03                     | 3,4194599E-11                  |
| 11     | 1 | 0,263524E+01                        | 0,758288E+00                     | 0,271720E+02                     | 3,2587700E-11                  |
|        | 2 | 0,109557E+02                        | 0,338266E+01                     | 0,607092E+03                     | 3,2587700E-11                  |
| 12     | 1 | 0,158107E+03                        | 0,483433E+02                     | 0,690154E+01                     | 3,2587700E-11                  |
|        | 2 | 0,149678E+05                        | 0,458573E+04                     | 0,942812E+03                     | 3,2587700E-11                  |
| 13     | 1 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
|        | 2 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
| 14     | 1 | 0,154724E+01                        | 0,491756E+00                     | 0,370922E+02                     | 3,4524598E-11                  |
|        | 2 | 0,1485910E-02                       | 0,5287930E-03                    | 0,103677E+02                     | 3,2587700E-11                  |
| 15     | 1 | 0,177188E+01                        | 0,496144E+00                     | 0,509104E+02                     | 3,2587700E-11                  |
|        | 2 | 0,155137E+00                        | 0,4740130E-01                    | 0,438253E+02                     | 3,2587700E-11                  |
| 16     | 1 | 0,157539E+01                        | 0,402363E+00                     | 0,369541E+01                     | 3,2587700E-11                  |
|        | 2 | 0,499975E+01                        | 0,145342E+01                     | 0,814242E+01                     | 3,2587700E-11                  |
| 17     | 1 | 0,364166E+01                        | 0,972437E+00                     | 0,133482E+02                     | 3,2587700E-11                  |
|        | 2 | 0,986619E+00                        | 0,285150E+00                     | 0,523725E+01                     | 3,2587700E-11                  |
| 18     | 1 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
|        | 2 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
| 19     | 1 | -                                   | -                                | 0,111639E+03                     | -                              |
|        | 2 | -                                   | -                                | 0,153220E+07                     | -                              |
| 20     | 1 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
|        | 2 | -                                   | -                                | -                                | -                              |
| 21     | 1 | -                                   | -                                | 0,953017E+02                     | -                              |
|        | 2 | -                                   | -                                | 0,480351E+05                     | -                              |
| 22     | 1 | -                                   | -                                | 0,436439E+02                     | 0,9539500E-02                  |
|        | 2 | -                                   | -                                | 0,104512E+04                     | -                              |

A tabela 5.5 mostra a fração da fissão de um actínídeo para produzir um PF, cujos valores são utilizados no cálculo de depleção dos PF.

Tabela 5.5: Rendimentos

| Nuclídeo | I135   | Xe135  | Pm149  |
|----------|--------|--------|--------|
| U234     | -      | -      | -      |
| U235     | 0,0630 | 0,0024 | 0,0107 |
| U236     | 0,0563 | 0,0016 | 0,0137 |
| U238     | 0,0683 | 0,0003 | 0,0161 |
| Np237    | 0,0666 | 0,0088 | 0,0127 |
| Pu238    | -      | -      | -      |
| Np239    | -      | -      | -      |
| Pu239    | 0,0645 | 0,0115 | 0,0124 |
| Pu240    | 0,0675 | 0,0070 | 0,0137 |
| Pu241    | 0,0707 | 0,0023 | 0,0152 |
| Am241    | -      | -      | -      |
| Am242m   | -      | -      | -      |
| Am242    | -      | -      | -      |
| Pu242    | 0,0690 | 0,0026 | 0,0162 |
| Am243    | -      | -      | -      |
| Cm242    | -      | -      | -      |
| Cm244    | -      | -      | -      |

Na região de transmutação estão os nuclídeos Np237, Am241, Am242m, Am242, Am243, Cm242 e Cm244, cujas concentrações isotópicas iniciais são apresentadas na tabela 5.6. Deve ser notado que os índices na cadeia de depleção dos AM não

Tabela 5.6: Concentração inicial dos AM na região de transmutação.

| Nuclídeo | Índice | Concentração Inicial<br>( <i>átomos/barn.cm</i> ) |
|----------|--------|---|
| Np237    | 5      | 1,390E-06   |
| Am241    | 9      | 8,775E-08   |
| Am242m   | 10     | 1,112E-09   |
| Am242    | 11     | 3,041E-10   |
| Am243    | 13     | 2,041E-07   |
| Cm242    | 14     | 3,338E-08   |
| Cm244    | 15     | 3,534E-08   |

são os mesmos que os índices na cadeia de depleção dos Actínídeos. Isto é devido a que, como já foi dito no capítulo 2, embora tenha-se tomado a mesma cadeia para ambos, na cadeia de depleção dos AM foram excluídos os nuclídeos U238 e Pu239. Na região da fonte externa se encontra, além da fonte, material estrutural (STRM). Esta fonte emite nêutrons com uma intensidade de  $10^{+11}$  *neutrons/cm<sup>2</sup>.s* e para as

malhas pertencentes à região da fonte tem-se que

$$\bar{s}_g^n = \begin{cases} 10^{+11}/\text{Tamanho da região} & ; g = 1 \\ 0 & ; g = 2 \end{cases}$$

O módulo ‘Problema de Fonte Fixa’ que é o encarregado de resolver a equação de difusão de nêutrons com fonte externa considera dois grupos de energia com  $\chi_1=1.0$  e  $\chi_2=0.0$ . O teste de convergência para o fluxo de nêutrons (nas iterações internas), foi:

$$\max_{n,g} \left| \frac{\bar{\phi}_g^{n(i+1)} - \bar{\phi}_g^{n(i)}}{\bar{\phi}_g^{n(i)}} \right| \leq \epsilon_{\bar{\phi}} \quad (5.1)$$

onde  $i$  é representa o índice de iteração e a tolerância, para o teste de convergência, foi de  $\epsilon_{\bar{\phi}} = 10^{-03}$ . O intervalo de queima foi considerado de 300 dias e dividido em 22 intervalos de tempo que são apresentados na tabela 5.7.

Tabela 5.7: Intervalos de tempo de queima.

| $l$ | Intervalo de tempo<br>(dias) | $l$ | Intervalo de tempo<br>(dias) |
|-----|------------------------------|-----|------------------------------|
| 1   | 3                            | 12  | 20                           |
| 2   | 3                            | 13  | 10                           |
| 3   | 14                           | 14  | 10                           |
| 4   | 20                           | 15  | 10                           |
| 5   | 20                           | 16  | 10                           |
| 6   | 20                           | 17  | 10                           |
| 7   | 20                           | 18  | 10                           |
| 8   | 20                           | 19  | 10                           |
| 9   | 20                           | 20  | 10                           |
| 10  | 20                           | 21  | 10                           |
| 11  | 20                           | 22  | 10                           |

## 5.2 Resultados obtidos com o Programa Cálculo de Transmutação

Os resultados obtidos com o programa ‘Cálculo de Transmutação’ são mostrados na tabela 5.8, a qual lista a concentração residual dos AM, após serem irradiados no reator por 300 dias e o percentual de transmutação, obtido da seguinte forma:

$$\text{Percentual de Transmutação} = \left( 1 - \frac{\text{Concentração Residual}}{\text{Concentração Inicial}} \right) \times 100\% \quad (5.2)$$

Pode-se observar que, depois de 300 dias, os percentuais de transmutações do Np237, Am241, Am242, Am243, Cm242 e Cm244, são de 0,19%, 0,83%, 99,3%, 0,10%, 70,9% e 2,49% respectivamente. Estes percentuais mostram o quanto desaparece destes núclídeos. Mas para o núclídeo Am242m o percentual foi negativo, indicando que a concentração deste núclídeo cresceu.

Tabela 5.8: Percentuais de transmutação dos AM depois de 300 dias de exposição no reator.

| AM     | Concentração Inicial<br>( <i>atomos/b.cm</i> ) | Concentração Residual<br>( <i>atomos/b.cm</i> ) | Percentual de Transmutação |
|--------|--|---|----------------------------|
| Np237  | 1,390E-06                                      | 1,38725E-06                                     | 0,19%                      |
| Am241  | 8,775E-08                                      | 8,70233E-08                                     | 0,83%                      |
| Am242m | 1,112E-09                                      | 1,17626E-09                                     | -5,78%                     |
| Am242  | 3,041E-10                                      | 2,16087E-12                                     | 99,3%                      |
| Am243  | 2,041E-07                                      | 2,03886E-07                                     | 0,10%                      |
| Cm242  | 3,338E-08                                      | 9,68585E-09                                     | 70,9%                      |
| Cm244  | 3,534E-08                                      | 3,44614E-08                                     | 2,49%                      |

Na figura 5.2 é mostrada a evolução no tempo da concentração do Np237. Já na figura 5.3 é mostrada a evolução das concentrações do Am241, Am242m e Am242. A figura 5.4 mostra a evolução das concentrações do Am243, Cm242 e Cm244 com o tempo.

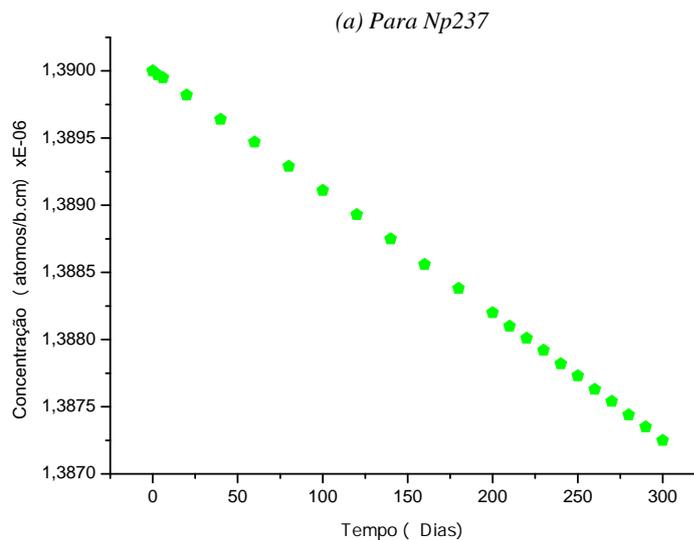


Figura 5.2: Evolução do Np237 (a).

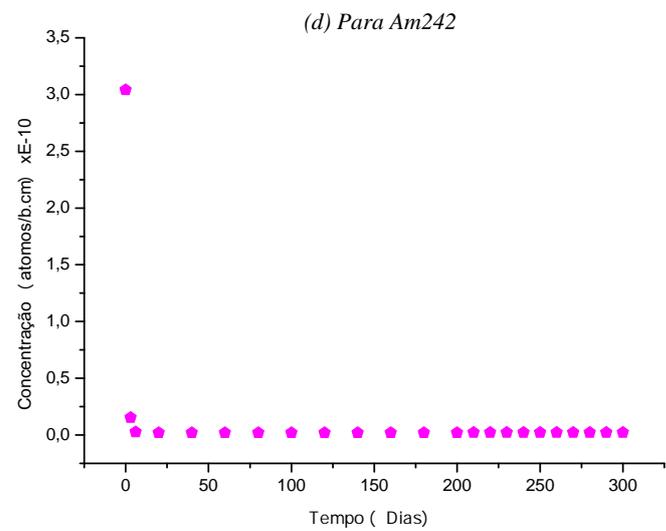
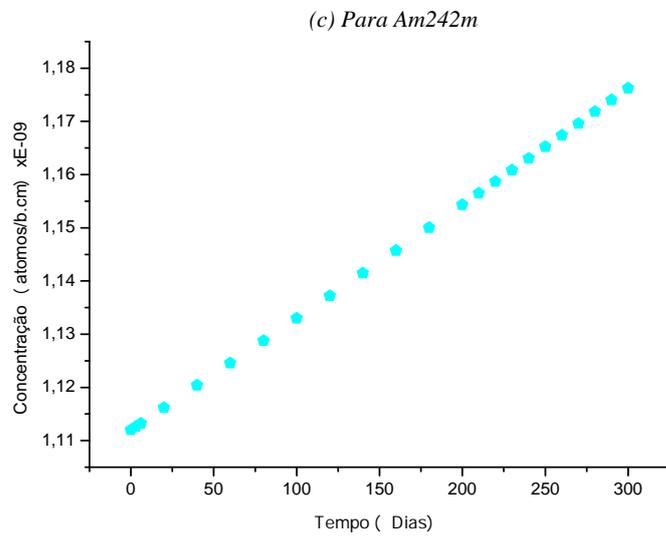
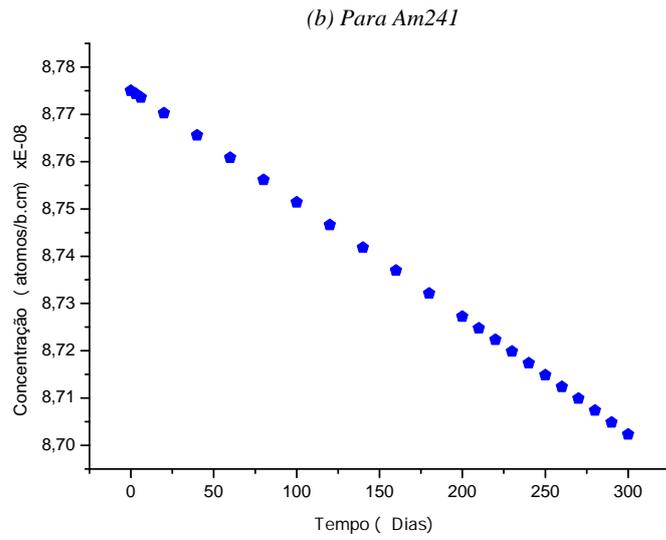


Figura 5.3: Evolução do Am241 (b), Am242m (c) e Am242 (d),

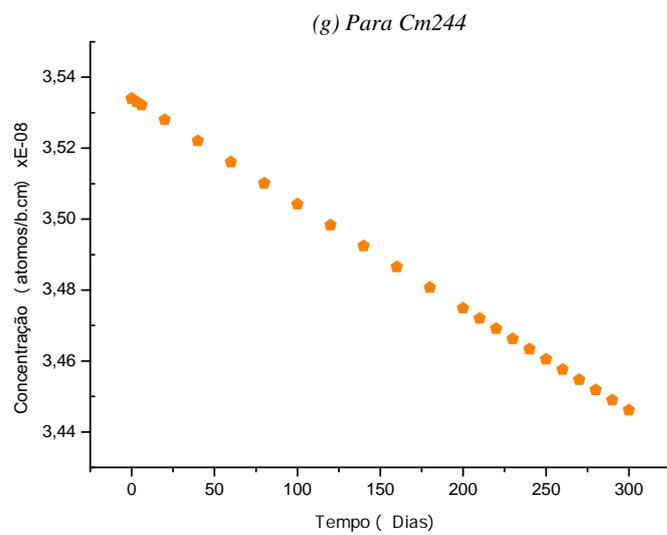
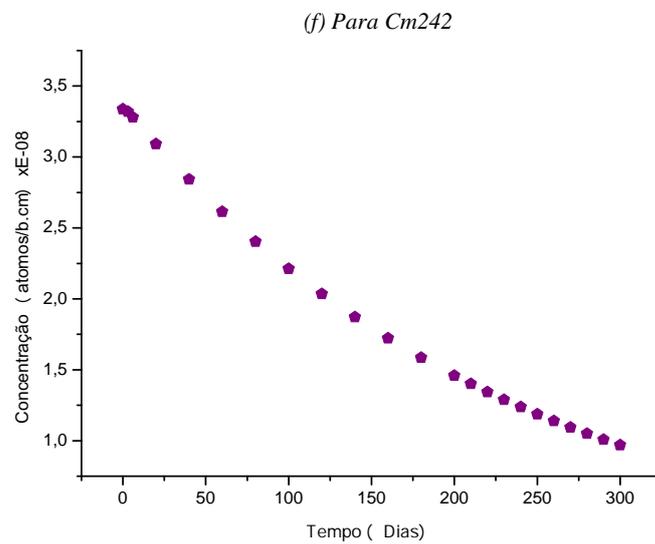
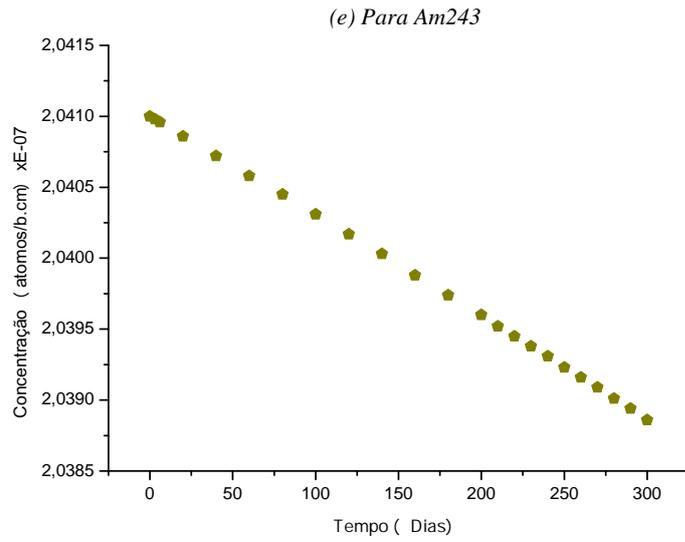


Figura 5.4: Evolução do Am243 (e), Cm242 (f) e Cm244 (g).

Na tabela 5.9 são mostrados os resultados obtidos com o programa ‘Cálculo de Transmutação’, para 300 dias de exposição.

Tabela 5.9: Concentração Residual depois de 300 dias de exposição.

| Nuclídeo | Concentração Inicial | Interna     | Externa     | Região de Transmutação |
|----------|----------------------|-------------|-------------|------------------------|
| U234     | 0,126020E-05         | 1,25994E-06 | 1,25867E-06 | 1,03846E-10            |
| U235     | 0,152537E-03         | 1,52513E-04 | 1,52399E-04 | 3,23293E-14            |
| U236     | -                    | 1,51451E-08 | 8,55105E-08 | 5,64850E-18            |
| U238     | 0,702007E-02         | 7,02001E-03 | 7,01970E-03 | -                      |
| Np237    | 1,390E-06            | 2,86253E-10 | 1,80652E-09 | 1,38725E-06            |
| Pu238    | -                    | 4,67780E-14 | 1,68444E-12 | 2,70589E-08            |
| Np239    | -                    | 6,33042E-10 | 3,79032E-09 | -                      |
| Pu239    | -                    | 5,27095E-08 | 3,17330E-07 | 4,75665E-11            |
| Pu240    | -                    | 1,76726E-11 | 5,81767E-10 | 1,09462E-09            |
| Pu241    | -                    | 1,03380E-14 | 2,08883E-12 | 2,61628E-12            |
| Am241    | 8,775E-08            | 9,64006E-17 | 1,95563E-14 | 8,70233E-08            |
| Am242m   | 1,112E-09            | 2,54569E-21 | 2,86742E-18 | 1,17626E-09            |
| Am242    | 3,041E-10            | 3,23771E-22 | 3,63134E-19 | 2,16087E-12            |
| Pu242    | -                    | 1,12303E-18 | 1,24945E-15 | 1,64044E-10            |
| Am243    | 2,041E-07            | 6,54627E-25 | 4,02294E-21 | 2,03886E-07            |
| Cm242    | 3,338E-08            | 1,31797E-20 | 1,48559E-17 | 9,68585E-09            |
| Cm244    | 3,534E-08            | 3,79073E-29 | 1,42670E-24 | 3,44614E-08            |
| I135     | -                    | 1,50021E-12 | 9,14982E-12 | 1,14949E-15            |
| Xe135    | -                    | 2,09796E-12 | 1,25465E-11 | 1,72346E-15            |
| Pm149    | -                    | 2,44013E-12 | 1,48326E-11 | 1,76054E-15            |
| Sm149    | -                    | 2,08406E-10 | 1,08445E-09 | 1,16079E-13            |

Nesta tabela, além das concentrações iniciais estão, também, as regiões do combustível (interna e externa, ou seja, regiões que estão mais próxima e mais longe, respectivamente, da fonte externa, vide figura 5.1) e na região de transmutação. Pode-se notar a criação dos isótopos de Plutônio e Urânio na região de transmutação. Estes materiais físseis aparecem graças ao decaimento  $\alpha$  e reação  $N2n$ , que representam as reações de ”feedback” exibidas na cadeia de depleção dos Actinídeos, conforme pode-se ver na figura 2.3. Também constam nesta tabela as concentrações dos PF produzidos a partir dos Actinídeos. Estes PF são nuclídeos de curta vida e de baixa radiotoxicidade que podem, portanto, ser armazenados em repositórios geológicos. O crescimento tanto do  $k_{eff}$  quanto da potência do reator está ligado ao fato que o decaimento  $\alpha$  de Am242, Cm242 e Cm244 levam à Pu240, Pu242 e Pu238, respectivamente. Este último, também por decaimento  $\alpha$ , leva a U234, gerando, deste modo mais Urânio e Plutônio. As figuras 5.5 e 5.6 mostram isto. Além disso, deve ser observado que o reator adotado nos cálculos não possui um mecanismo de bancos de barras de controle. E a fonte também é mantida constante ao largo de todo

intervalo de queima, que foi de 300 dias, implicando, então no crescimento tanto do  $k_{eff}$  quanto da potência.

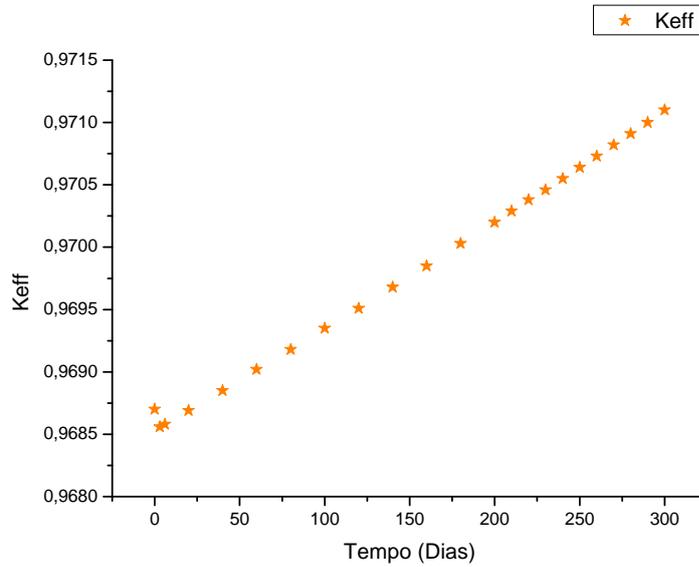


Figura 5.5: Evolução do  $k_{eff}$  com o tempo.

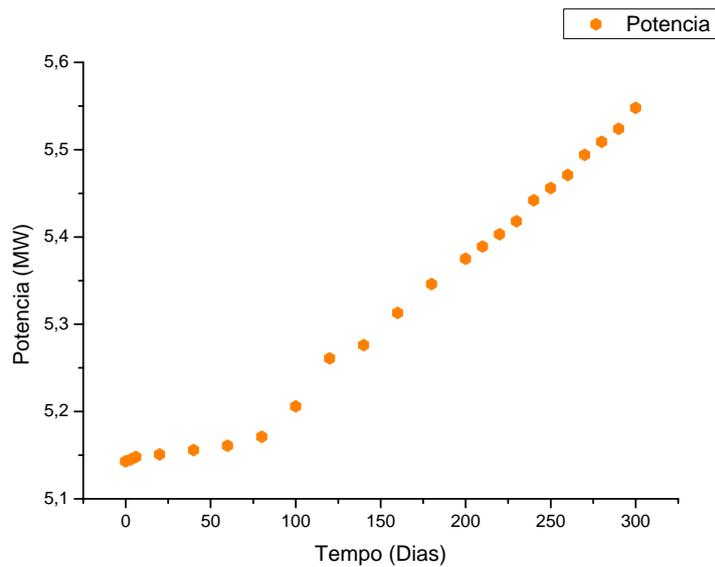


Figura 5.6: Evolução da potência com o tempo.

A tabela (5.10) apresenta como é modificado o valor de  $k_{eff}$  conforme as concentrações dos AM estão sendo variadas.

Tabela 5.10: Variação do  $k_{eff}$ .

| Combustível<br>(sem VQ) | Combustível<br>(com VQ) | AM<br>0,0243% | AM<br>0,243% | AM<br>2,43% | AM<br>4,86% |
|-------------------------|-------------------------|---------------|--------------|-------------|-------------|
| 1,17939                 | 0,96936                 | 0,96870       | 0,96412      | 0,95115     | 0,94711     |

Na tabela 5.10 são mostrados os fatores de multiplicação efetivos, obtidos com o módulo ‘Problema de Autovalor’, para diferentes carregamentos do núcleo. Na primeira coluna tem-se o  $k_{eff}$  para a região de combustível sem VQ e a região de transmutação contendo apenas água e material estrutural. Neste caso, verifica-se que o reator é super-crítico. Já na segunda coluna tem-se o  $k_{eff}$  para a região de combustível agora com VQ e a região de transmutação mantida sem os AM. Da terceira até a sexta colunas, são mostrados os fatores de multiplicação para a região do combustível com VQ e a região de transmutação agora contendo AM. Os percentuais que ali aparecem foram obtidos através da razão entre a soma das concentrações dos AM e a soma das concentrações dos núclídeos numa das regiões do combustível. Verifica-se que a medida que se aumenta a quantidade de AM, o  $k_{eff}$  torna-se cada vez menor, ou seja, os AM comportam-se como se fossem VQ [15]. Neste trabalho, os resultados apresentados na tabela 5.8 e 5.9 foram trabalhados com a razão entre a soma das concentrações dos AM e a soma das concentrações dos núclídeos na região do combustível igual a 0,0243%

# Capítulo 6

## Conclusões

O desenvolvimento desta dissertação teve como tema principal o cálculo de transmutação de Actínídeos Menores em reatores avançados de tipo ADS. Para isto, implementou-se um programa principal chamado ‘Cálculo de Transmutação’ que é caracterizado por ser um processo evolutivo. Em primeiro lugar, o intervalo de queima que foi tomado consistiu de 300 dias, que por sua vez, foi dividido em 22 intervalos de tempo de queima. Com isto teve-se um módulo que desenvolveu uma parte temporal e um outro módulo que desenvolveu a parte espacial. O primeiro módulo chamado ‘Cálculo de Depleção’ encarregou-se de resolver as equações de depleção em cada instante de tempo, ou seja, calcula as concentrações dos nuclídeos. O segundo módulo, chamado ‘Problema de Fonte Fixa’, foi responsável por resolver a equação de difusão de nêutrons com fonte externa, ou seja, calcula o fluxo de nêutrons em um reator subcrítico.

Desenvolvido o programa, foram obtidos os percentuais de transmutação dos AM, onde os nuclídeos do Np237, o Am241, o Am242, o Am243, o Cm242 e o Cm244 reduzem suas concentrações, e o Am242m é o único nuclídeo que aumenta sua concentração. Então o programa calculou a transmutação de boa quantidade de nuclídeos de AM. Embora pareça pouca, essa quantidade é significativa pois a transmutação destes AM de longa vida de alto nível radiativo elimina um perigo radiativo a longo prazo ao transformá-lo por um outro nuclídeo de curto prazo. Além disso, são produzidos Produtos de Fissão, que são nuclídeos estáveis que não representam perigo radiológico e que poderiam ser finalmente armazenados em repositórios geológicos. Assim mesmo, observou-se que tanto o fator de multiplicação efetivo quanto a potência vão aumentando na evolução do tempo, isto porque os AM estão sendo transmutados e conseqüentemente materiais físséis estão sendo criados (isótopos de Plutônio, Pu240, Pu242, Pu238 este último, também por decaimento  $\alpha$  levará à criação de U234, gerando, deste modo mais Urânio e Plutônio) devido às reações de “feedback” e à permanente incineração com uma fonte constante ao longo de todo intervalo de queima, conduzindo ao incremento do fator de multiplicação e geração

de potência.

Adicionalmente, foi visto que nesta dissertação trabalhou-se com a razão entre a soma das concentrações dos AM e a soma das concentrações dos núclídeos na região do combustível igual a 0,0243%. Ainda foi visto como é modificado o fator de multiplicação efetivo a medida que iam variando as concentrações dos AM, isto com a finalidade de observar o comportamento da subcriticalidade. Reparou-se que ao aumentar-se as concentrações dos AM no reator se reduzia o fator de multiplicação, assim concluiu-se que os AM poderiam atuar como materiais absorvedores, ou seja, VQ. Finalmente, nosso trabalho pode ser melhorado realizando um cálculo de transmutação mais realista aplicado para uma geometria cilíndrica ou anular, típica das configurações dos reatores avançados de tipo ADS. Este será nosso próximo trabalho de pesquisa.

# Referências Bibliográficas

- [1] IAEA. *Nuclear Technology Review 2013*. Fifty-seventh regular session GC(57)/INF/2, 2013.
- [2] IAEA. *Status of minor actinide fuel development*. Nuclear Energy Series NF-T-4.6, International Atomic Energy Agency, Viena, 2009.
- [3] BELLER, D. E., TUYLE, G. J. V., BENNETT, D. “The U.S. accelerator transmutation of waste program”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, , n. 463, pp. 468–486, 2001.
- [4] KADI, Y., REVOL, J. *Design of an accelerator-driven system for the destruction of nuclear waste*. In: Report ISBN 92-95003-17-9, ICTP, Trieste, 2002.
- [5] TSUJIMOTO, K., SASA, T., NISHIHARA, K. “Study of Accelerator-driven system for transmutation of high-level waste from LWR”. In: *7th International Conference on Nuclear Engineering*, Tokyo, 1999.
- [6] NIFENECKER, H., MEPLAN, O., DAVID, S. *Accelerator Driven subcritical reactors*. London, Institute of Physics Publishing, 2003.
- [7] OECD/NEA. *Physics and Safety of Transmutation Systems*,. A status report ISBN 92-64-01082-3, 2006.
- [8] ABDERRAHIM, H. A., BAETEN, P. “A Multi-purpose hYbrid Research Reactor for High-tech Applications”, *Advances in Reactor Physics - Linking Research, Industry, and Education*, 2012.
- [9] STACEY, W. M. *Nuclear reactor physics*. Germany, Wiley-VCH, Winheim, 2004.
- [10] DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1976.
- [11] ALVIM, A. C. M., DA SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S. “Depletion calculation for a nodal reactor physics code”. In: *Proceedings of the 18th International Conference on Nuclear Engineering*, pp. –, Xi’an, China, maio 2010.

- [12] NISHIHARA, K., IWASAKI, T., UDAGAWA, Y. “A new static and dynamic one-point equation and analytic and numerical calculations for a subcritical system”, *Nuclear Science and Technology*, v. 40, n. 7, pp. 481–492, 2003.
- [13] NAKAMURA, S. *Computational Methods in engineering and science*. New York, John Wiley & Sons, Inc., 1977.
- [14] ALVIM, A. C. M. *Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear*. Brasil, Editora Certa, 2007.
- [15] LIU, B., WANG, K., TU, J. “Transmutation of minor actinides in the pressurized water reactors”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 64, n. –, pp. 86–92, 2014.