

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

FATORES DE DANCOFF DE CÉLULAS UNITÁRIAS EM GEOMETRIA *CLUSTER*  
COM ABSORÇÃO PARCIAL DE NÊUTRONS

por

Letícia Jenisch Rodrigues

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, janeiro de 2011.

FATORES DE DANCOFF DE CÉLULAS UNITÁRIAS EM GEOMETRIA *CLUSTER*  
COM ABSORÇÃO PARCIAL DE NÊUTRONS

por

Letícia Jenisch Rodrigues

Mestre em Engenharia

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

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

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

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Antonio Carlos Marques Alvim (COPPE/UFRJ)

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

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros (IPRJ/UERJ)

Prof. Dr. Francis Henrique Ramos França

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 26 de janeiro de 2011.

Dedico esta tese ao meu marido, Marcelo,  
e às minhas filhas, Bruna e Maria Eduarda,  
fontes inesgotáveis de inspiração e alegria.

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente, agradeço à minha família. Além do apoio incondicional pude contar com a compreensão de vocês nos momentos em que, mesmo estando em casa, estava “ausente”, mergulhada em meus estudos. A vocês minha eterna gratidão e amor. Também agradeço à minha filha Bruna pela ajuda na leitura cautelosa e criteriosa desta tese.

Agradeço aos meus estimados mestres (meu orientador, professor Dr. Marco Túllio Menna Barreto de Vilhena, e meu co-orientador, Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite) por todas as lições ensinadas, pelas oportunidades, pela confiança e, principalmente, por me conduzirem durante os primeiros passos nesse “campo” do conhecimento tão fantástico e apaixonante.

Agradeço aos meus amigos pelo incentivo, pelo apoio e por me contagiarem com sua juventude. Em especial agradeço aos amigos Marcos Bassani Rech e Marcelo Schramm, pois ajuda de vocês foi essencial para que eu pudesse alcançar meus objetivos. A vocês, desejo muito sucesso.

Agradeço a Comissão Nacional de Energia Nuclear, CNEN, pelo apoio financeiro através da bolsa de doutorado, fundamental durante minha formação. À Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS, agradeço pelo ensino de qualidade que desfrutei desde o ensino médio profissionalizante até o mais alto nível que se pode chegar, o doutorado. Finalmente, agradeço ao Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, representado por seus funcionários e corpo docente, pelo apoio nas participações em congressos. Em especial, gostaria de agradecer ao senhor Paulo Kutter, secretário do PROMEC, profissional dedicado sempre disposto a ajudar.

## RESUMO

O fator de Dancoff, em sua formulação clássica, corrige a corrente de nêutrons incidente na superfície de uma vareta combustível devido à presença das demais varetas da célula. Alternativamente, esse fator pode ser interpretado como a probabilidade de um nêutron oriundo de uma vareta de combustível entrar em outra vareta sem colidir no moderador ou no revestimento. Para combustíveis perfeitamente absorvedores essas definições são equivalentes. Entretanto, quando se assume a hipótese de absorção parcial no combustível, essa equivalência não se verifica. Então, os fatores de Dancoff devem ser determinados em termos de probabilidades de colisão. Ao longo dos últimos anos, vários trabalhos, usando ambas as definições, vêm relatando melhorias no cálculo dos fatores Dancoff. Neste trabalho, esses fatores são determinados através do método de probabilidades de colisão para células em geometria *cluster* com contorno externo quadrado, assumindo-se absorção total (*Black Dancoff Factors*) e parcial (*Grey Dancoff Factors*) no combustível. A validação dos resultados é feita através de comparações com a célula cilíndrica equivalente. O cálculo é realizado considerando-se reflexão especular, para a célula quadrada, e condição de contorno difusa (*white*) para a célula cilíndrica equivalente. Os resultados obtidos, com o aumento do tamanho das células, evidenciam o comportamento assintótico da solução. Além disso, são computados fatores de Dancoff para as células canadenses CANDU-37 e CANFLEX por ambas as metodologias de cálculo, direta e probabilística. Finalmente, os fatores de multiplicação efetivo,  $k_{eff}$ , para as células com contorno externo quadrado e a cilíndrica equivalente, são determinados e as diferenças registradas para os casos onde se assumem as hipóteses de absorção total e parcial.

**Palavras-chave:** células cilíndricas, células quadradas, geometria *cluster*, fatores de Dancoff, fator de multiplicação efetivo.

## ABSTRACT

In its classical formulation, the Dancoff factor for a perfectly absorbing fuel rod is defined as the relative reduction in the incurrent of resonance neutrons into the rod in the presence of neighboring rods, as compared to the incurrent into a single fuel rod immersed in an infinite moderator. Alternatively, this factor can be viewed as the probability that a neutron emerging from the surface of a fuel rod will enter another fuel rod without any collision in the moderator or cladding. For perfectly absorbing fuel these definitions are equivalent. In the last years, several works appeared in literature reporting improvements in the calculation of Dancoff factors, using both the classical and the collision probability definitions. In this work, we step further reporting Dancoff factors for perfectly absorbing (Black) and partially absorbing (Grey) fuel rods calculated by the collision probability method, in cluster cells with square outer boundaries. In order to validate the results, comparisons are made with the equivalent cylindricalized cell in hypothetical test cases. The calculation is performed considering specularly reflecting boundary conditions, for the square lattice, and diffusive reflecting boundary conditions, for the cylindrical geometry. The results show the expected asymptotic behavior of the solution with increasing cell sizes. In addition, Dancoff factors are computed for the Canadian cells CANDU-37 and CANFLEX by the Monte Carlo and Direct methods. Finally, the effective multiplication factors,  $k_{eff}$ , for these cells (cluster cell with square outer boundaries and the equivalent cylindricalized cell) are also computed, and the differences reported for the cases using the perfect and partial absorption assumptions.

**Keywords:** cylindrical cells, square cells, cluster geometry, Dancoff factors, effective multiplication factor.

# ÍNDICE

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO .....</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA .....</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>ABSORÇÃO RESSONANTE EM SISTEMAS HETEROGÊNEOS ...</b>	<b>22</b>
3.1	Método das Probabilidades de Colisão .....	22
3.2	Probabilidades de Colisão .....	25
3.3	Fatores de Dancoff .....	30
3.3.1	<i>Black Dancoff factors</i> – materiais totalmente absorvedores .....	30
3.3.2	<i>Grey Dancoff factors</i> – materiais parcialmente absorvedores .....	34
3.4	A Aproximação de Wigner-Seitz .....	35
3.5	O Fator de Multiplicação Efetivo – $k_{eff}$ .....	37
<b>4</b>	<b>METODOLOGIA UTILIZADA NO CÁLCULO DE FATORES DE DANCOFF EM GEOMETRIA CLUSTER .....</b>	<b>43</b>
4.1	O Código WIMSD .....	43
4.1.1	Sub-rotina PIJM .....	48
4.1.2	Sub-rotina PIJMC .....	51
4.1.3	Sub-rotina SQUARE .....	54
4.2	Caracterização das Células Combustíveis .....	56
4.2.1	Células Canadenses CANDU-37 e CANFLEX .....	57
4.2.2	Célula Hipotética de Seis Regiões .....	59
4.3	Determinação dos Fatores de Dancoff .....	62
4.3.1	Sub-rotina SIGMA .....	62
4.3.2	Sub-rotina DANCOFF .....	64
4.3.4	A Reflexão das Trajetórias dos Nêutrons .....	68
4.4	A Determinação do $k_{eff}$ .....	71
<b>5</b>	<b>RESULTADOS .....</b>	<b>74</b>
5.1	Células Canadenses CANDU-37 e CANFLEX .....	74
5.2	Análise de Convergência .....	80
5.3	Célula Hipotética de Seis Regiões .....	86
5.4	O Fator de Multiplicação Efetivo das Células .....	93
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS .....</b>	<b>95</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>	<b>97</b>
	<b>APÊNDICE A – Diagrama “V” da Tese .....</b>	<b>101</b>

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Notações usadas para o cálculo das correções de Dancoff. Adaptado de [Carlvik, 1967].....	7
Figura 2.2	Plano $xy$ perpendicular às varetas combustíveis, onde $O_1$ e $O_2$ são os eixos das varetas, $A$ é o ponto de emissão na vareta 1 e $B$ é o ponto de entrada na vareta 2 [Fehér et al., 1994].....	9
Figura 2.3	Seção transversal da célula combustível canadense CANDU-37.....	11
Figura 2.4	Sistema de coordenadas cilíndricas utilizado em [Kim e Cho, 1999]..	13
Figura 2.5	Seção transversal da célula combustível canadense CANFLEX.....	14
Figura 2.6	Malhas de integração utilizadas em PIJ. Adaptado de [Bogado Leite, 2000].....	15
Figura 2.7	Malhas de integração individuais utilizadas em PIJM. Adaptado de [Bogado Leite, 2000].....	16
Figura 2.8	Célula com contorno externo quadrado. Destaque para a reflexão especular.....	17
Figura 3.1	Seção transversal (plano $xy$ ) de uma célula combustível com contorno externo cilíndrico. Em destaque as regiões $a$ e $b$ e o ponto $D$ . Adaptado de [Anderson, 1973].....	26
Figura 3.2	Seção longitudinal da célula combustível. Em destaque uma das possíveis trajetórias do nêutron. Adaptado de [Anderson, 1973].....	27
Figura 3.3	Eliminação da coordenada $z$ num sistema de geometria cilíndrica. Adaptado de [Carlvik, 1965].....	31
Figura 3.4	Esquema e notações utilizadas na derivação do fator de Dancoff para dois corpos negros imersos num meio infinito cuja seção de choque macroscópica total é $\Sigma^*$ . Adaptado de [Carlvik, 1965].....	32
Figura 3.5	Equivalência entre as células combustíveis unitárias [Glasstone e Bell, 1970].....	36
Figura 3.6	Trajetórias típicas para um nêutron numa célula cilíndrica equivalente (a) e numa célula real (b) [Glasstone e Bell, 1970].....	37



Figura 3.7	Esquema simplificado de uma reação em cadeia. Adaptado de [Duderstadt e Hamilton, 1942].....	38
Figura 3.8	Ciclo do nêutron em função dos parâmetros utilizados para a determinação do fator de multiplicação efetivo [Barros, 2007].....	39
Figura 4.1	Sequências computacionais do código WIMSD. Tradução livre de [Askew et al., 1966].....	44
Figura 4.2	Células com contorno externo cilíndrico e quadrado em geometria <i>cluster</i> .....	46
Figura 4.3	Exemplo de trajetória descrita por um nêutron no plano perpendicular ao axial. Observam-se onze segmentos cada um associado a diferentes regiões pertencentes a setores anulares ou de varetas.....	47
Figura 4.4	Fluxograma simplificado da sub-rotina PIJM. Em destaque as sub-rotinas auxiliares.....	49
Figura 4.5	Fluxograma simplificado da sub-rotina PIJMC. Em destaque as sub-rotinas auxiliares.....	52
Figura 4.6	Seleção da trajetória do nêutron. A direção de referência pertence ao plano horizontal $xy$ . Adaptado de [Bogado Leite, 2003].....	53
Figura 4.7	Ilustração utilizada para demonstrar a determinação do ponto onde a trajetória do nêutron, reta $LT$ , intercepta o limite da célula quadrada, reta $LI$ .....	55
Figura 4.8	Célula CANFLEX [AECL, 2009].....	57
Figura 4.9	Célula combustível CANDU-37 [Bruce, 2009].....	57
Figura 4.10	Seção transversal da célula combustível canadense CANFLEX.....	58
Figura 4.11	Seção transversal da célula combustível canadense CANDU-37.....	58
Figura 4.12	Seção transversal da célula combustível hipotética com contorno externo quadrado.....	60
Figura 4.13	Seção transversal da célula cilíndrica equivalente.....	60
Figura 4.14	Sequência computacional simplificada da sub-rotina SIGMA.....	63
Figura 4.15	Sequência computacional da sub-rotina PIJM após modificações.....	66
Figura 4.16	Sequência computacional da sub-rotina PIJMC após modificações....	67

Figura 4.17	Coordenadas dos traços primário e secundário que representam a trajetória percorrida por um nêutron. Adaptado de [Bogado Leite, 2001].....	68
Figura 4.18	Fluxograma simplificado dos cálculos efetuados pelo código WIMSD. Tradução livre de [Kulikowska, 2000].....	71
Figura 5.1	Fatores de Dancoff determinados pelo Método Direto para a célula combustível CANDU-37, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Jenisch Rodrigues, 2007].....	75
Figura 5.2	Fatores de Dancoff determinados pelo Método de Monte Carlo para a célula combustível CANDU-37, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Jenisch Rodrigues et al., 2008b].....	76
Figura 5.3	Figura 5.3 – Fatores de Dancoff para a célula combustível CANDU-37, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Kim e Cho, 1999].....	77
Figura 5.4	Fatores de Dancoff determinados pelo Método Direto para a célula combustível CANFLEX, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Jenisch Rodrigues et al., 2008a].....	78
Figura 5.5	Fatores de Dancoff determinados pelo Método de Monte Carlo para a célula combustível CANFLEX, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Jenisch Rodrigues et al., 2008b].....	79

Figura 5.6	Fatores de Dancoff para a célula combustível CANFLEX, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ [Kim e Cho, 1999].....	79
Figura 5.7	Comparação entre a célula combustível original (esquerda) e a célula combustível utilizada no estudo de convergência (direita). Desenho em escala.....	80
Figura 5.8	Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 1), assumindo absorção total no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ ...	82
Figura 5.9	Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 2), assumindo absorção total no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ ...	83
Figura 5.10	Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 1), assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ ..	84
Figura 5.11	Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 2), assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ ..	85
Figura 5.12	Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método Direto com $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	88
Figura 5.13	Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	88
Figura 5.14	Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método Direto com $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	89

Figura 5.15	Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	89
Figura 5.16	Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método Direto com $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	91
Figura 5.17	Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	92
Figura 5.18	Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método Direto com $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	93
Figura 5.19	Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ e $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .....	93
Figura A1	Diagrama “V” da Tese Fatores de Dancoff de células unitárias em geometria <i>cluster</i> com absorção parcial de nêutrons.....	103

## LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	Principais características das células combustíveis CANDU-37 e CANFLEX [Bogado Leite, 2004b].....	59
Tabela 4.2	Propriedades da célula combustível hipotética [Bogado Leite, 2003].....	61
Tabela 4.3	Tabelas com as possibilidades de trajetórias com reflexão especular [Bogado Leite, 2001].....	70
Tabela 5.1	Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) para cada posição de vareta, em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ , para células do tipo CANDU-37.....	74
Tabela 5.2	Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) para cada posição de vareta, em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ , para células do tipo CANFLEX.....	78
Tabela 5.3	Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método Direto [Jenisch Rodrigues et al., 2009].....	81
Tabela 5.4	Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.....	81
Tabela 5.5	Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método Direto [Jenisch Rodrigues et al., 2009].....	83

Tabela 5.6	Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.....	84
Tabela 5.7	Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método Direto.....	86
Tabela 5.8	Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.....	87
Tabela 5.9	Diferenças relativas entre os fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível), determinados por métodos diferentes, para as três configurações de células.....	87
Tabela 5.10	Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método Direto.....	90
Tabela 5.11	Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador, $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.....	90
Tabela 5.12	Diferenças relativas entre os fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível), determinados por métodos diferentes, para as três configurações de células.....	91
Tabela 5.13	Valores obtidos para o $k_{eff}$ no caso da célula original pelo Método Direto.....	94
Tabela 5.14	Valores obtidos para o $k_{eff}$ no caso da célula original pelo Método de Monte Carlo.....	94
Tabela 5.15	Valores obtidos para o $k_{eff}$ no caso da célula dez vezes maior pelo Método Direto.....	94
Tabela 5.16	Valores obtidos para o $k_{eff}$ no caso da célula dez vezes maior pelo Método de Monte Carlo.....	94

## LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

AECL	<i>Atomic Energy of Canada Limited</i>
AEE	<i>Atomic Energy Establishment</i>
AEEW	<i>Atomic Energy Establishment of Winfrith</i>
CANDU-37	<i>CANada Deuterium Uranium</i>
CANFLEX	<i>CANDU FLEXible</i>
CNEN	<i>Comissão Nacional de Energia Nuclear</i>
FORTRAN	<i>FORmula TRANslation</i>
HWR	<i>Heavy Water Reactor</i>
NCM	<i>Neutron Current Method</i>
NEA	<i>Nuclear Energy Agency</i>
NR	<i>Narrow Resonance</i>
PROMEC	<i>Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica</i>
PWR	<i>Pressurized Water Reactor</i>
SCALE	<i>Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation</i>
UFRGS	<i>Universidade Federal do Rio Grande do Sul</i>
WIMS	<i>Winfrith Improved Multi-group Scheme</i>
WIMSD	<i>Winfrith Improved Multi-group Scheme – version D</i>
WIMSD-4	<i>Winfrith Improved Multi-group Scheme – version D4</i>

## LISTA DE SÍMBOLOS

### Caracteres Arábicos

$A$	Número de massa
$B$	Fator de Bell
$C$	Fator de Dancoff
$d$	Medida do espaçamento horizontal de um arranjo de varetas (passo)
$D$	Correção de Dancoff
$f$	Fator de utilização térmica
$I$	Intensidade da corrente de nêutrons que entra através da superfície de uma vareta combustível em um arranjo de varetas
$I_0$	Intensidade da corrente de nêutrons que entra através da superfície de uma vareta combustível em um meio moderador infinito
$I_{het}$	Integral de ressonância de um sistema heterogêneo
$I_{hom}$	Integral de ressonância de um sistema homogêneo
$k$	Fator de multiplicação
$k_{eff}$	Fator de multiplicação efetivo
$k_{\infty}$	Fator de multiplicação para meios infinitos
$Ki_n$	Função de Bickley de ordem $n$
$l$	Módulo do vetor que conecta as superfícies de duas varetas distintas
$l_F$	Módulo do vetor que atravessa a região de combustível
$l_M$	Módulo do vetor que atravessa a região do moderador
$l_G$	Módulo do vetor que atravessa a região do <i>gap</i>
$l_C$	Módulo do vetor que atravessa a região do revestimento
$M$	Número de passos da integração angular
$n$	Número de regiões atravessadas pelo nêutron
$\hat{n}$	Vetor normal à superfície
$N$	Número de passos da integração radial
$N_1$	Número de nêutrons gerados por fissão térmica
$N_2$	Número de nêutrons na geração seguinte
$N^{238}$	Densidade atômica do $U^{238}$



$P$	Probabilidade de escape à ressonância
$P_a$	Probabilidade do nêutron colidir na região $a$
$P_{a \rightarrow a}$	Probabilidade de um nêutron emitido uniforme e isotropicamente na região $a$ colidir em outra região $a$
$P'_{a \rightarrow a}$	Probabilidade de um nêutron emitido uniforme e isotropicamente na região $a$ colidir na própria região $a$ (probabilidade de autocolisão)
$P_{a \rightarrow b}$	Probabilidade de um nêutron emitido uniforme e isotropicamente na região $a$ colidir na região $b$
$P_{AC}$	Probabilidade de ser absorvido no combustível
$P_b$	Probabilidade do nêutron colidir na região $b$
$P_F$	Probabilidade de um nêutron originário da região $F$ com energia $E$ sofrer sua próxima colisão em outra região
$P_{FIS}$	Probabilidade de induzir fissão
$P_{f \rightarrow f}$	Probabilidade de colisão no sistema isolado
$P_{F \rightarrow F}$	Probabilidade de colisão no arranjo de varetas
$P_{F \rightarrow M}$	Probabilidade de um nêutron originário do combustível sofrer sua próxima colisão no moderador
$P_M$	Probabilidade de um nêutron originário da região $M$ com energia $E$ sofrer sua próxima colisão em outra região
$P_{M \rightarrow F}$	Probabilidade de um nêutron originário do moderador sofrer sua próxima colisão no combustível
$P_{NFR}$	Probabilidade de não-fuga enquanto nêutron rápido
$P_{NFT}$	Probabilidade de não fuga enquanto nêutron térmico
$P_0$	Probabilidade de escape do combustível
$P_0^*$	Probabilidade de escape do combustível modificada
$r$	Raio da vareta combustível
$\bar{r}$	Comprimento de corda médio
$\bar{r}^*$	Comprimento de corda médio modificado
$R$	Raio do círculo circunscrito ao quadrado
$S$	Superfície
$S_{ef}$	Superfície efetiva
$S_C$	Intensidade da fonte no revestimento

$S_M$	Intensidade de fonte no moderador
$T$	Caminho óptico
$t$	Projeção no plano $xy$ da distância geométrica percorrida pelo nêutron
$t^*$	Projeção no plano $xy$ da distância geométrica percorrida pelo nêutron associada ao meio compreendido entre as regiões $a$ e $b$
$t_b$	Projeção no plano $xy$ da distância geométrica percorrida pelo nêutron associada à região $a$
$T(AB)$	Distância óptica relativa à trajetória descrita pelo segmento de reta $\overline{AB}$
$u_n$	Variáveis randômicas
$V_a$	Volume da região $a$ por unidade de altura
$V_b$	Volume da região $b$ por unidade de altura
$V_F$	Volume da região de combustível
$V_M$	Volume da região de moderação

### Caracteres Gregos

$\alpha$	Ângulo azimutal
$\alpha_r$	Ângulo entre a normal e a projeção da direção da trajetória do nêutron no plano $xy$
$\varepsilon$	Fator de fissão rápida
$\lambda$	Energia fracional mínima
$\lambda_{mF}$	Energia fracional mínima do moderador da região $F$
$\lambda_{aF}$	Energia fracional mínima do absorvedor da região $F$
$\lambda_{mM}$	Energia fracional mínima do moderador da região $M$
$\tau$	Espessura óptica
$\phi$	Coordenada azimutal
$\Phi$	Fluxo que entra através de uma vareta combustível num arranjo de varetas
$\Phi_F$	Fluxo médio de nêutrons na região de combustível
$\Phi_M$	Fluxo médio de nêutrons na região de moderação
$\Phi_0$	Fluxo que entra pela superfície da vareta isolada num meio moderador infinito
$\nu$	Número de nêutrons gerados
$\eta$	Número de nêutrons produzidos por absorção no combustível

$\theta_Z$	Ângulo entre o plano horizontal e a direção da trajetória do nêutron
$\sigma_F^f$	Seção de choque microscópica de fissão do combustível
$\sigma_F^a$	Seção de choque microscópica de absorção do combustível
$\sigma_{pot}$	Seção de choque microscópica potencial na região de combustível
$\Sigma_a$	Seção de choque macroscópica total associada à região $a$
$\Sigma_F^a$	Seção de choque macroscópica de absorção do combustível
$\Sigma_{Nc}^a$	Seção de choque macroscópica de absorção do resto do material presente no núcleo
$\Sigma_b$	Seção de choque macroscópica total associada à região $b$
$\Sigma^*$	Seção de choque macroscópica total associada ao meio compreendido entre as regiões $a$ e $b$
$\Sigma_C$	Seção de choque macroscópica total do revestimento
$\Sigma_F$	Seção de choque macroscópica total do combustível
$\Sigma_M$	Seção de choque macroscópica total do moderador
$\Sigma_{MF}^s$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do moderador misturado ao combustível
$\Sigma_F^s$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do combustível
$\Sigma_M^s$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do moderador da região de moderação
$\Sigma_{pot}$	Seção de choque macroscópica potencial
$\xi$	Variável Adimensional
$\chi$	Variável Adimensional
$\sum_j$	Operador matemático representando o somatório de $j$ elementos
$\hat{\Omega}$	Direção na qual o nêutron descreve sua trajetória
$d\Omega_R$	Taxa de emissão do elemento de volume dentro do elemento de ângulo sólido

# 1 INTRODUÇÃO

O código WIMS (*Winfrith Improved Multi-group Scheme*) ainda é um dos mais utilizados códigos de gerenciamento de núcleo de reatores, podendo tratar tanto barras combustíveis como partes maiores do núcleo. Ao longo do tempo, sofreu algumas modificações<sup>1</sup> que foram testadas e implementadas. Essas alterações produziram resultados que se encontram publicados na literatura especializada. A análise conjunta dos resultados e do modelo de cálculo da absorção ressonante no combustível evidenciou a necessidade de novas modificações.

Sabe-se que a absorção ressonante em arranjos compactos é fortemente influenciada por um parâmetro chamado fator de Dancoff. Inicialmente, esse fator corrigia a superfície efetiva de uma vareta combustível devido à presença das demais varetas do arranjo, compensando a diminuição da incidência de nêutrons na vareta em questão. Este efeito de sombreamento foi deduzido para o caso de duas varetas paralelas idênticas e o combustível era considerado um absorvedor perfeito (*black Dancoff factors*). Desde então, vários esforços foram empenhados para a obtenção de valores cada vez mais precisos.

Visando à simplificação de cálculos, usualmente, substituiu-se o contorno externo da célula real (quadrado ou hexagonal) por um contorno externo cilíndrico de forma que o volume total se mantenha. Essa hipótese é, muitas vezes, chamada de aproximação de Wigner-Seitz. Embora seja amplamente aceita, em algumas situações ela pode representar um desvio considerável da realidade. Além disso, em muitos casos, assume-se que os materiais combustíveis apresentam comportamento semelhante aos de corpos negros, ou seja, são totalmente absorvedores, o que não representa o que de fato acontece dentro do núcleo do reator.

Em trabalho anterior<sup>2</sup>, assumiu-se a condição de absorção parcial do combustível no cálculo de fatores de Dancoff (*grey Dancoff factors*). Esses fatores foram determinados a partir do código WIMSD (*Winfrith Improved Multi-group Scheme – version D*) através de uma metodologia direta de cálculo. Os resultados obtidos utilizando a célula combustível canadense CANDU-37 (*CANada Deuterium Uranium*) mostraram-se satisfatórios, ou seja, consistentes na comparação entre métodos diferentes. Entretanto, a comparação limitou-se a uma análise qualitativa, pois os resultados disponíveis encontravam-se apenas na forma gráfica.

---

<sup>1</sup> No presente trabalho utiliza-se a versão WIMSD-4 (*Winfrith Improved Multi-group Scheme – version D4*).

<sup>2</sup> Dissertação de Mestrado [Jenisch Rodrigues, 2007].

Diante disso, a presente tese tem por objetivo dar continuidade ao trabalho anterior, estendendo o cálculo direto para a célula CANFLEX (*CANDU Flexible*), visando verificar a precisão do método no caso de células irregulares, com diâmetros de varetas diferentes. Além disso, implementa-se a hipótese de absorção parcial do combustível no cálculo de fatores de Dancoff utilizando-se o Método de Monte Carlo. A determinação desses fatores utilizando duas metodologias independentes de cálculo proporciona uma comparação mais efetiva levando à validação dos mesmos.

No que tange à aproximação de Wigner-Seitz, determina-se tanto *black Dancoff factors* quanto *grey Dancoff factors* para as células bidimensionais com contorno externo quadrado e sua equivalente cilíndrica. Esse procedimento é feito por ambas as técnicas, direta e probabilística de cálculo, de modo a permitir a comparação dos resultados. Mensura-se, então, o quanto a aproximação de Wigner-Seitz afeta o cálculo desses fatores. Finalizando, avalia-se, também, os efeitos das variações dos fatores de Dancoff no fator de multiplicação efetivo,  $k_{eff}$ , dessas células.

Visando apresentar o embasamento teórico, o método utilizado e os resultados, a presente tese encontra-se estruturada em seis capítulos, sendo este, introdutório, o primeiro. No Capítulo 2, apresenta-se a revisão bibliográfica destacando-se os pontos principais das obras utilizadas como referência. O Capítulo 3 é dedicado ao modelo teórico da absorção ressonante em sistemas heterogêneos, ao método das probabilidades e ao detalhamento do cálculo do fator de Dancoff. Além disso, faz-se uma breve descrição da aproximação de Wigner-Seitz e do fator de multiplicação efetivo.

O código WIMSD, suas sub-rotinas PIJM e PIJMC, assim como as demais envolvidas, são detalhadas no Capítulo 4. Nesse contexto, apresenta-se um breve histórico das rotinas evidenciando as modificações propostas ao longo do tempo. Adicionalmente, também são abordadas a metodologia utilizada para o cálculo dos fatores, em ambas as sub-rotinas, e a determinação do fator de multiplicação efetivo pelo código WIMSD. No Capítulo 5 realiza-se a apresentação e análise dos resultados. E, finalmente, dedica-se o Capítulo 6 às conclusões e perspectivas.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

No trabalho desenvolvido por Wigner et al., 1955, os autores pretendiam estimar a magnitude da absorção ressonante de esferas de urânio imersas em um meio moderador. O método, originalmente proposto em 1941<sup>3</sup>, é tido como pioneiro nesse tipo de cálculo em meios heterogêneos. Sua característica principal era a divisão do tratamento da absorção em duas partes: uma de volume (*mass absorption*) e uma de superfície (*surface absorption*).

A primeira parte fornecia a absorção de nêutrons no combustível, os quais haviam sido espalhados dentro da região de ressonância do mesmo. Esse termo era proporcional ao número de átomos de urânio ( $U^{238}$ ) presentes na amostra. A constante de proporcionalidade dependia, principalmente, da seção de choque de espalhamento associada ao átomo de urânio. Logo, qualquer material estranho à amostra deveria ser eliminado, haja vista que a absorção do combustível como um todo era representada pela absorção da amostra.

A segunda era relacionada à absorção de nêutrons no combustível que outrora haviam sido espalhados dentro da região de ressonância do moderador. Essa dependia da seção de choque de espalhamento dos materiais misturados ao urânio. Não era tão importante quanto a primeira, consistindo apenas numa correção ao primeiro termo. Entretanto, era necessário que o diâmetro do elemento combustível fosse, pelo menos, da ordem de poucos centímetros.

Um aspecto relacionado à determinação da absorção ressonante foi considerado por Dancoff e Ginsburg, 1944. A explicação pode ser entendida a partir da comparação entre dois sistemas. O primeiro é composto por uma vareta combustível e uma região de moderador infinita. O combustível assume a condição de corpo negro, ou seja, todo nêutron que entra nessa região é absorvido. Por outro lado, no moderador tem-se uma fonte de intensidade constante. Para essa configuração, o número de nêutrons que entra através da superfície da vareta é denotado por  $I_0$ . O segundo sistema contém a mesma vareta combustível, porém circundada por um arranjo de varetas vizinhas. Nessa última configuração, alguns nêutrons serão absorvidos por outras varetas, que não são a vareta em questão. Agora, o número de nêutrons que entra através da superfície da vareta é denotado por  $I$ .

No caso de um arranjo de varetas próximas, a corrente de nêutrons que entra numa determinada vareta é menor que a corrente que entraria se essa vareta estivesse isolada num meio moderador infinito. O efeito dessa redução no fluxo, atribuída à presença das varetas adjacentes, recebeu a denominação de *rod shadowing*, em português, “sombreamento”. Dessa

---

<sup>3</sup> O material apareceu, originalmente, no Documento C-4. Foi considerado “não-confidencial” pela Comissão de Energia Atômica dos EUA em 29/12/1953. Tradução livre de [Wigner et al., 1955].

forma, o fator de Dancoff<sup>4</sup> pode ser definido em termos dessa redução na corrente de nêutrons, ou seja,

$$C = 1 - \frac{I}{I_0}. \quad (2.1)$$

Nesse modelo físico, esse efeito pode ser interpretado como uma diminuição na superfície efetiva do combustível, ou seja,

$$S_{ef} = (1 - C)S, \quad (2.2)$$

na qual  $S$  é a superfície real,  $C$  é o fator de Dancoff e  $S_{ef}$  é a superfície efetiva. Dancoff e Ginsburg, 1944, deduzem o efeito de sombreamento para o caso de duas varetas paralelas idênticas, e o combustível é considerado um absorvedor perfeito. Na equação abaixo, sua formulação é apresentada para o caso de uma vareta combustível com contorno externo cilíndrico

$$C = \int_0^{2\pi} \frac{1}{\pi^2 r} d\alpha \int_{-r}^r Ki_3[\tau(\alpha, y)] dy, \quad (2.3)$$

na qual  $r$  é o raio da vareta,  $\tau$  é a espessura óptica entre os dois corpos negros ao longo da trajetória do nêutron no plano  $xy$ ,  $y$  e  $\alpha$  são as coordenadas linear e azimutal dessa trajetória, respectivamente, e  $Ki_3$  são as funções de Bickley de ordem três definidas como

$$Ki_3(x) = \int_0^{\pi/2} \text{sen}^2(\theta) \exp\left(\frac{-x}{\text{sen}\theta}\right) d\theta. \quad (2.4)$$

Um novo método para o cálculo de integrais de ressonância, em meios homogêneos e heterogêneos, foi apresentado por Nordheim, 1962, resultando em um módulo computacional produzido para o IBM-7090. Consistia, basicamente, numa solução numérica direta da integral para o fluxo médio no absorvedor. O objetivo principal era calcular a absorção

---

<sup>4</sup> A notação varia com os diferentes autores. No presente trabalho,  $C$  é denominado fator de Dancoff. Entretanto,  $C$  poderá ser chamado de correção de Dancoff, enquanto  $D$  será chamado de fator de Dancoff. Modificações na nomenclatura serão devidamente explicitadas, caso contrário, vale a notação utilizada neste trabalho.

ressonante tendo como dados de entrada parâmetros de ressonância, temperatura, composição e geometria.

Entretanto, faz-se referência a esse trabalho devido a outro aspecto abordado em seu escopo. O interesse reside, mais especificamente, na derivação de uma aproximação racional para a probabilidade de escape do combustível,  $P_0$ , em termos de uma seção de choque de escape efetiva. Segundo Nordheim, 1962, a correção de Dancoff deveria ser utilizada nos casos envolvendo arranjos constituídos por varetas muito próximas dispostas em sistemas homogêneos. Normalmente, a modificação no comprimento de corda médio,  $\bar{r}$ ,

$$\bar{r}^* = \frac{\bar{r}}{(1-C)}. \quad (2.5)$$

seria suficiente. Contudo, se as varetas absorvedoras fossem muito finas, a probabilidade de escape do combustível modificada,  $P_0^*$ ,

$$P_0^* = P_0 \frac{1-C}{1-C(1-\Sigma_f \bar{r} P_0)}, \quad (2.6)$$

forneceria uma aproximação melhor. Nesta última forma, a correção de Dancoff,  $C$ , aplicava-se a um arranjo infinito de elementos combustíveis parcialmente transparentes.

Carlvik, 1965, determinou probabilidades de colisão usando um método baseado na integração gaussiana para geometrias anular e *cluster*. Concomitantemente, esquemas similares foram propostos para calcular a distribuição do fluxo e fatores de Dancoff, aqui definidos pela Equação 2.1. Os cálculos foram efetuados para *clusters* hexagonais (contendo 7, 19 e 37 varetas) e para um arranjo quadrado infinito. Nesse trabalho, os fatores foram determinados a partir de um método direto que tentava aproximar os valores obtidos de funções suaves. No caso dos *clusters*, foram usadas aproximações através de funções racionais.

De um modo geral, os métodos subseqüentes determinavam a absorção ressonante baseados no conceito de probabilidades de colisão. Assim, muitas vezes, transformava-se um meio originalmente heterogêneo em meio homogêneo, a partir de teoremas de equivalência. Nesse contexto, o efeito de sombreamento ainda era relevante, mas possuía outra interpretação. A correção utilizada passou a ser



$$D=1-C, \quad (2.7)$$

na qual  $C$  era a correção de Dancoff e  $D$  era o fator de Dancoff. O fator  $D$  era definido como a probabilidade de colisão no moderador para nêutrons entrando através da interface combustível-moderador com uma distribuição cossenoidal.

Nos reatores refrigerados a gás, há uma região (de gás), ao redor da vareta, que possui uma seção de choque macroscópica relativamente menor que a do moderador. O método utilizado até então para resolver esse problema consistia em homogeneizar todo o material que estivesse no entorno da vareta. Era notório que essa aproximação poderia influenciar os valores calculados para a correção de Dancoff. No entanto, desconhecia-se a magnitude de sua influência.

Dando continuidade ao trabalho anterior, Carlvik, 1967, investigou o erro, na determinação dessa correção, relacionado à homogeneização do *gap* que circundava as varetas combustíveis. Usando arranjos em *clusters* hexagonais e quadrados, tratou as regiões do *gap* e do moderador separadamente. Devido à simetria do problema, a correção pôde ser escrita como

$$C = \frac{1}{\alpha_0} \int_0^{\alpha_0} d\alpha \frac{1}{2r} \int_{-r}^r \frac{Ki_3(\tau)}{Ki_3(0)} dy, \quad (2.8)$$

na qual o ângulo  $\alpha_0$  vale  $\pi/4$  para o arranjo quadrado e  $\pi/6$  para o arranjo hexagonal,  $\tau$  é a espessura óptica de  $t$  no plano  $xy$  e  $Ki_3$  é a função de Bickley de ordem três, Equação 2.4. Essas notações encontram-se esquematizadas na Figura 2.1.

A Equação 2.8 foi aproximada, usando regra trapezoidal simples, através de

$$C = \frac{4}{\pi} \frac{1}{2NM} \sum_{n=1}^{2N} \sum_{m=1}^M Ki_3(\tau_{n,m}), \quad (2.9)$$

na qual  $M$  é o número de passos da integração angular e  $N$  é o número de passos da integração radial. A correção aproximada pela Equação 2.7 foi calculada para uma vareta central disposta num arranjo de 201 por 201 varetas.

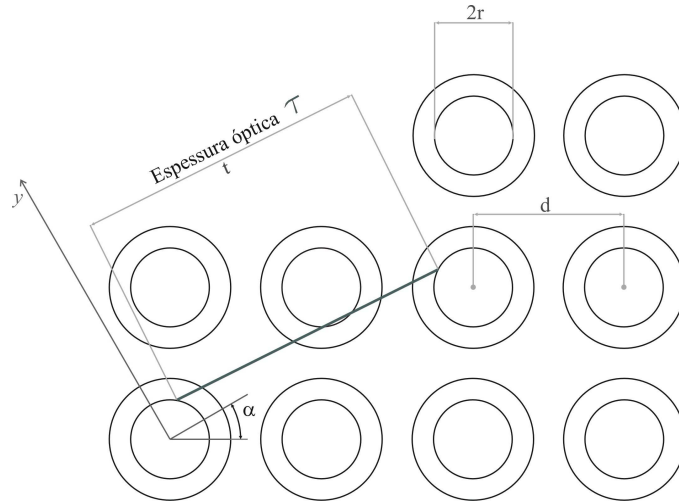


Figura 2.1 – Notações usadas para o cálculo das correções de Dancoff. Adaptado de [Carlvik, 1967].

Num sistema puro de duas regiões, combustível-moderador, a correção era função de duas variáveis adimensionais,  $\xi$  e  $\chi$ ,

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi = \Sigma_M d \\ \chi = \frac{r}{d} \end{array} \right. , \quad \begin{array}{l} (2.10a) \\ (2.10b) \end{array}$$

nas quais  $\Sigma_M$  é a seção de choque macroscópica do moderador,  $d$  é a medida do espaçamento horizontal do arranjo e  $r$  é o raio da vareta, Figura 2.1. Usando essas variáveis, podia-se escrever a razão entre os volumes do moderador,  $V_M$ , e do combustível,  $V_F$ . No caso do arranjo quadrado,

$$\frac{V_M}{V_F} = \frac{1}{\pi y^2} - 1. \quad (2.11)$$

Para investigar o efeito da homogeneização, foram efetuados cálculos apenas para o arranjo quadrado. Porém, utilizando vários valores para  $\Sigma_M d$  e  $r/d$  com duas espessuras para o *gap*, 10% e 20% do raio da vareta. Também foram calculadas as correções para o arranjo equivalente onde o moderador e o *gap* encontravam-se misturados. Valores para a correção de Dancoff,  $C$ , desconsiderando o *gap* já eram conhecidos.

Quando o *gap* era introduzido no sistema a correção de Dancoff aumentava, haja vista que a região do moderador deveria se tornar mais transparente quando se retirava material. Se o *gap* e o moderador remanescente eram homogeneizados essa correção decrescia, o que poderia ser entendido do ponto de vista físico [Carlvik, 1967].

Carlvik, 1967, constatou que a homogeneização funcionava bem quando  $\Sigma_M d$  e  $r/d$  eram pequenos. Os piores casos, no entanto, não eram muito realistas porque a razão de volume entre moderador e combustível era muito pequena. Isso implicava um grande valor para a razão  $r/d$  (supermoderação). Assim, concluiu que para pequenas razões entre volumes, a consideração da região do *gap* consistia num método muito melhor que a homogeneização. A técnica descrita acima foi implementada na sub-rotina DASQHE<sup>5</sup> e posteriormente incorporada ao código WIMS<sup>6</sup>.

Seguiram-se, então, vários métodos para a determinação dos fatores de Dancoff. Contudo, em Fehér et al., 1994, os autores acreditavam que os códigos computacionais disponíveis ainda não haviam sido aprimorados o suficiente. Isto é, melhorias em termos de precisão ainda eram possíveis e desejáveis principalmente nos casos envolvendo geometrias mais complexas. Uma solução para o problema foi alcançada através do desenvolvimento de um novo módulo computacional que foi implementado no código SCALE. O algoritmo DANCOFF-MC, baseado na técnica de Monte Carlo, foi escrito para obter fatores de Dancoff em arranjos arbitrários contendo elementos combustíveis cilíndricos ou esféricos. Os elementos podiam apresentar diferentes composições, assim eram caracterizados como parcialmente ou totalmente absorvedores.

Os cálculos efetuados através do método de Monte Carlo são baseados no modelo de histórias de nêutrons, isto é, o cálculo desses fatores assume um modelo físico de transporte de nêutron numa dada geometria. Nesse caso, esse processo resulta em probabilidades de escape corrigidas. Assim, o algoritmo DANCOFF-MC calcula a probabilidade de um nêutron, emitido isotropicamente da região de combustível de um elemento em consideração, entrar na região combustível de outro elemento sem sofrer colisão no moderador ou no revestimento.

Utilizando a hipótese que a fonte de nêutrons possui intensidade constante em toda a superfície do combustível, o fator de Dancoff pode ser calculado como [Fehér et al., 1994],

---

<sup>5</sup> Sub-rotina cuja função era o cálculo das correções de Dancoff para sistemas com geometrias simples. Detalhes em Halsall, 1980.

<sup>6</sup> Descrito brevemente a seguir, sendo detalhado na seção 4.1.

$$C = \frac{\int ds \int \hat{n} \cdot \hat{\Omega} \exp[-\Sigma_M l_M(s, \hat{\Omega}) - \Sigma_C l_C(s, \hat{\Omega})] d\Omega}{\int ds \int \hat{n} \cdot \hat{\Omega} d\Omega}, \quad (2.12)$$

na qual  $l$  ( $l=l_M+l_C+l_G$ ) é o comprimento do vetor que sai de um ponto  $s$  da superfície da vareta combustível em questão atravessando as regiões do moderador ( $l_M$ ), do *gap* ( $l_G$ ) e do revestimento ( $l_C$ ), em direção,  $\hat{\Omega}$ , à superfície de outra vareta combustível. Os demais termos são as seções de choque macroscópicas totais do moderador,  $\Sigma_M$ , e do revestimento,  $\Sigma_C$ , e o vetor normal à superfície da vareta combustível em questão,  $\hat{n}$ . O intervalo de integração para  $\hat{\Omega}$  estende-se sobre todos os ângulos que satisfazem a condição  $\hat{n} \cdot \hat{\Omega} > 0$  e o intervalo para  $s$  estende-se sobre toda a superfície da vareta.

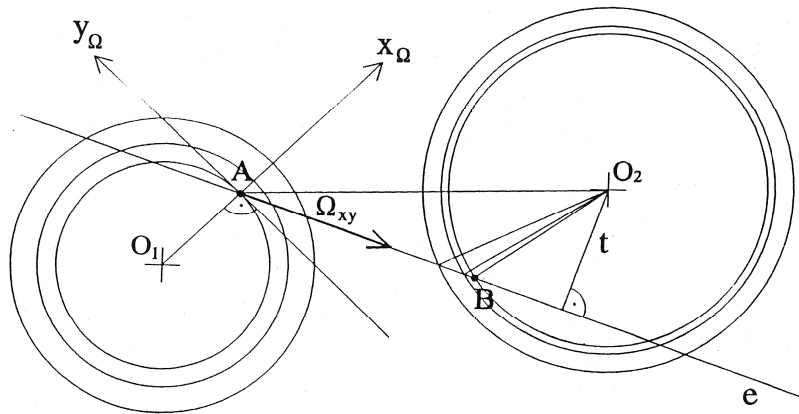


Figura 2.2 – Plano  $xy$  perpendicular às varetas combustíveis, onde  $O_1$  e  $O_2$  são os eixos das varetas,  $A$  é o ponto de emissão na vareta 1 e  $B$  é o ponto de entrada na vareta 2 [Fehér et al., 1994].

O esquema de cálculo utilizado por Fehér et al., 1994, para materiais combustíveis totalmente absorvedores, considerando um sistema com duas varetas, Figura 2.2, é resumido a seguir. A posição de emissão,  $A$ , e a direção na qual o nêutron descreve sua trajetória,  $\hat{\Omega}$ , são escolhidas randomicamente. A direção  $\hat{\Omega}$  é selecionada usando uma densidade de probabilidade para o cosseno do ângulo com a normal,  $\hat{n}$ , à superfície, proporcional a  $\hat{n} \cdot \hat{\Omega}$ , e um ângulo azimutal uniformemente distribuído no plano perpendicular a  $\hat{n}$ . A seguir, o algoritmo verifica quais são as varetas atravessadas por essa trajetória. Apenas a distância até a vareta mais próxima,  $\overline{AB}$ , é contabilizada.

Uma vez que o nêutron deve atravessar regiões de revestimento e *gap* para alcançar outra região de combustível as distâncias percorridas nessas duas regiões também são computadas. Usando as seções de choque macroscópicas totais do moderador e do revestimento, o fator de atenuação exponencial fornece a probabilidade do nêutron, após passar por essas regiões, alcançar a superfície da próxima vareta sem colidir. Essa probabilidade é armazenada para o posterior cálculo da média sobre todos os pontos de emissão e todas as diferentes direções das trajetórias.

Para materiais parcialmente absorvedores, o algoritmo utilizado é basicamente o mesmo. Porém, para que a semitransparência das varetas seja contabilizada, o termo exponencial do integrando da Equação 2.12 é substituído pela expressão

$$\exp(-g_1)\{[1 - \exp(-h_1)] + \exp(-g_2)\{[1 - \exp(-h_2)] + \dots\}\}, \quad (2.13)$$

na qual

$$g_1 = \Sigma_{C,0} l_{C,0} + \Sigma_M l_{M,1} + \Sigma_{C,1} \frac{l_{C,1}}{2}, \quad (2.14)$$

$$g_i = \Sigma_{F,i-1} l_{F,i-1} + \Sigma_{C,i-1} \frac{l_{C,i-1}}{2} + \Sigma_M l_{M,i} + \Sigma_{C,i} \frac{l_{C,i}}{2}, \quad i = 2, \dots, n, \quad (2.15)$$

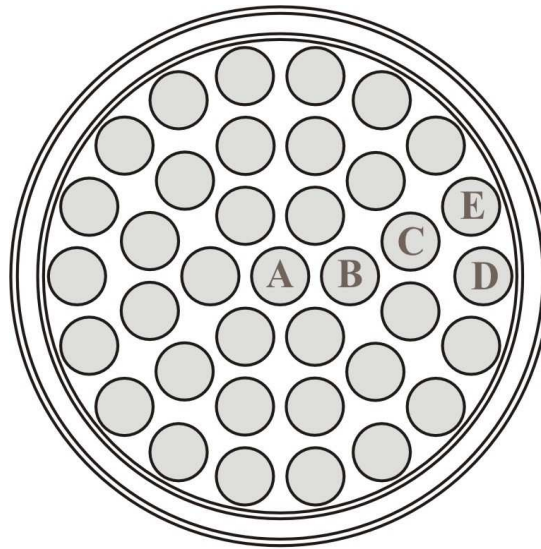
e

$$h_i = \Sigma_{F,i} l_{F,i} \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.16)$$

na qual  $n$  é o número de varetas atravessadas, os subíndices  $C$ ,  $M$  e  $F$  referem-se às regiões de revestimento, moderador e combustível, respectivamente, e  $i$  caracteriza as varetas atravessadas. Ou seja,  $i = 0$  indica a vareta de origem,  $i = 1$  indica a primeira vareta atravessada e assim sucessivamente.

Além de outros exemplos, em Fehér et al., 1994, foi utilizada a célula combustível canadense CANDU-37, Figura 2.3. A célula possui 37 varetas de  $\text{UO}_2$  dispostas num arranjo compacto no interior de um tubo de pressão concêntrico a um tubo externo os quais são separados por uma região de gás. O revestimento das varetas é de Zircaloy-4 e tanto o

refrigerante quanto o moderador são de água pesada. O algoritmo DANCOFF-MC [Fehér et al., 1994] determinou esses fatores para cinco posições simetricamente distintas de varetas combustíveis, indicadas na Figura 2.3 através das letras: A, B, C, D e E. A dependência desses fatores com o aumento da seção de choque do moderador foi apresentada apenas na forma gráfica. A superioridade do método de Monte Carlo no trato de geometrias irregulares, opção não aplicável a outros métodos disponíveis, foi evidenciada.



### CANDU

Figura 2.3 – Seção transversal da célula combustível canadense CANDU-37.

Neste ponto, é importante salientar a diferença entre o método proposto por Nordheim, 1962, e o proposto por Fehér et al., 1994. O primeiro requeria como parâmetro de entrada fatores de Dancoff tabelados para combustíveis totalmente absorvedores. A compensação, devido à “semitransparência” do combustível, era feita através da Equação 2.6. Tratava-se, então, de uma “correção aproximada” limitando-se a arranjos uniformes. O segundo método ofereceu um tratamento mais geral, aplicando-se a arranjos arbitrários e contabilizando diretamente a parcialidade, ou não, da absorção no combustível.

A relação de equivalência entre um sistema homogêneo e um heterogêneo tem sido usada no cálculo da seção de choque de ressonância na maioria dos códigos para núcleos de reatores. Essa relação pode ser estabelecida se a probabilidade de colisão no combustível, no caso heterogêneo, for expressa como o somatório de termos racionais. A precisão do cálculo da integral de ressonância depende de quão precisa é a expressão, através de termos racionais,

da probabilidade de colisão no combustível. Essa probabilidade está relacionada ao fator de Dancoff nos casos envolvendo arranjos de varetas bem próximas [Kim e Cho, 1999].

Visando calcular a criticalidade em arranjos de varetas combustíveis muito próximas, Kim e Cho, 1999, determinaram fatores de Dancoff assumindo absorção parcial e total do combustível utilizando o método de Monte Carlo. Nesse trabalho, o fator de Dancoff é definido como a probabilidade de um nêutron, emitido de um elemento combustível com uma distribuição cossenoidal, entrar em outro elemento sem sofrer colisões no moderador e no revestimento.

Segundo Fehér et al., 1994, sob a hipótese de intensidade constante da fonte sobre toda a superfície da região do combustível, o fator de Dancoff pode ser calculado a partir da Equação 2.12. Se as varetas combustíveis possuem geometria cilíndrica, Figura 2.4, as seguintes relações podem ser obtidas

$$\hat{n} \cdot \hat{\Omega} = \cos \theta_z \cos \alpha_r \quad (2.17a)$$

e

$$d\Omega = \cos \theta_z d\theta_z d\alpha_r, \quad (2.17b)$$

nas quais  $\theta_z$  é o ângulo entre o plano horizontal e a direção da trajetória do nêutron,  $\hat{\Omega}$ ,  $\alpha_r$  é o ângulo entre a normal,  $\hat{n}$ , e a projeção da direção da trajetória do nêutron no plano  $xy$ ,  $\alpha$  é o ângulo azimutal que identifica o ponto de emissão do nêutron na superfície do combustível e  $r$  é o raio da vareta combustível. Assim, utilizando as relações acima, a Equação 2.12 é reescrita em termos de

$$C = \frac{r \int_0^{2\pi} d\alpha \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \alpha_r d\alpha_r \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \vartheta_z \exp \left[ \frac{(-\Sigma_M l_M - \Sigma_C l_C)}{\cos \vartheta_z} \right] d\vartheta_z}{r \int_0^{2\pi} d\alpha \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \alpha_r d\alpha_r \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \vartheta_z d\vartheta_z}. \quad (2.18)$$

As variáveis randômicas,  $u_1, u_2, u_3$ , para a localização do ponto de emissão do nêutron e sua trajetória assumem valores pertencentes ao intervalo  $[0,1]$ . Assim, as variáveis da Equação 2.18 podem ser descritas por

$$\alpha = 2\pi u_1, \quad (2.19a)$$

$$\text{sen}\alpha_r = 2u_2 - 1, \quad (2.19b)$$

e

$$\text{sen}\theta_z = u_3. \quad (2.19c)$$

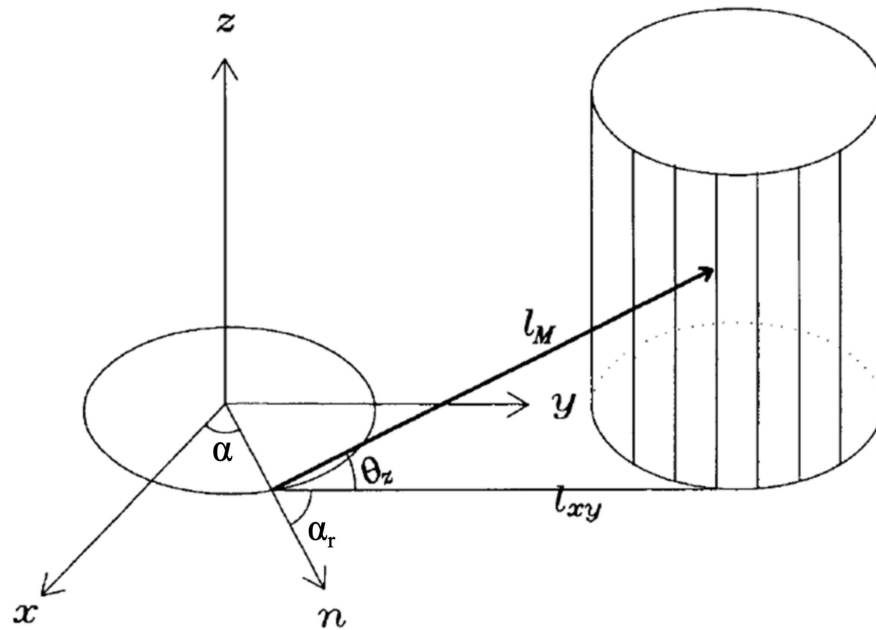


Figura 2.4 – Sistema de coordenadas cilíndricas utilizado em [Kim e Cho, 1999].

No caso de uma vareta combustível cilíndrica, substituindo as relações acima, Equações 2.19, na Equação 2.18, o fator de Dancoff pode ser representado como [Kim e Cho, 1999]

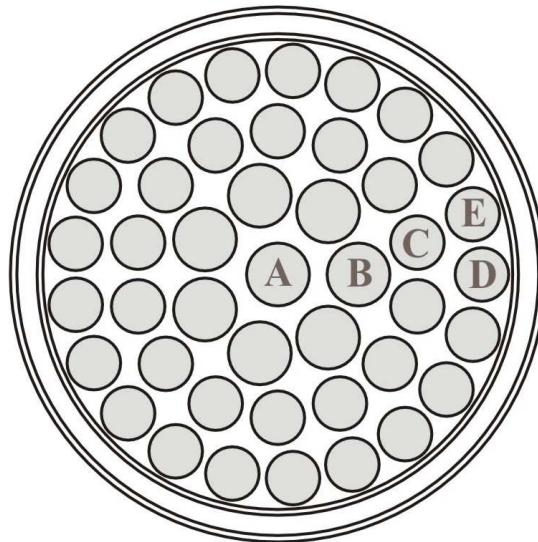
$$C = \int_0^1 du_1 \int_0^1 du_2 \int_0^1 \frac{4}{\pi} \sqrt{1-u_3^2} \exp \left[ \frac{(-\Sigma_M l_M - \Sigma_C l_C)}{\sqrt{1-u_3^2}} \right] du_3. \quad (2.20)$$

O programa acompanha a trajetória de cada nêutron emitido até ele colidir com o combustível, totalmente absorvedor, ou escapar através da superfície da célula. Para cada uma é computado o valor de  $C$ , Equação 2.20, de acordo com as regiões atravessadas. Assim que o número máximo de histórias é atingido, o valor do fator de Dancoff (*black Dancoff factor*) é obtido através da média dos valores computados para  $C$ .



Para o cálculo envolvendo materiais parcialmente absorvedores (*grey Dancoff factor*), o algoritmo é modificado para permitir que os nêutrons passem, repetidamente, através de regiões de combustível, bem como regiões de moderador e regiões de revestimento. A probabilidade de serem absorvidos no combustível é obtida através da soma das probabilidades para cada região de combustível atravessada pela trajetória [Kim e Cho, 1999].

Como exemplos, são calculados fatores de Dancoff para arranjos infinitos de varetas cilíndricas, em *clusters* hexagonal e quadrado, assim como para as células do tipo CANDU-37 e CANFLEX, Figura 2.5. Essa última possui varetas de diâmetros diferentes, o que torna o cálculo desses fatores mais interessante para comparação entre métodos.



### CANFLEX

Figura 2.5 – Seção transversal da célula combustível canadense CANFLEX.

Os resultados obtidos com os arranjos infinitos foram comparados aos obtidos por Carlvik, 1967. Os resultados para a célula canadense CANDU-37 foram comparados aos calculados pelo algoritmo DANCOFF-MC [Fehér et al., 1994]. Em ambos os casos, os resultados mostraram-se satisfatórios, ou seja, consistentes na comparação entre métodos diferentes. Posteriormente, foram aplicados no cálculo da criticalidade usando o código WIMSD.

Originalmente, o código WIMSD possuía uma rotina responsável pelo cálculo de probabilidades de colisão em duas dimensões. Sua primeira versão chamava-se PIJ cuja função era determinar probabilidades de escape e colisão em sistemas envolvendo geometrias

bidimensionais complexas. Supunha, basicamente, que as fontes de nêutrons dentro de cada região estivessem uniformemente distribuídas e que a emissão era isotrópica. Seu esquema de cálculo, embora rápido, mostrava-se ineficiente, pois a malha de integração era independente do tamanho das regiões, Figura 2.6. Além disso, as integrações duplas das funções de Bickley eram calculadas por regra trapezoidal simples. Consequentemente, produziam desvios consideráveis nas probabilidades calculadas.

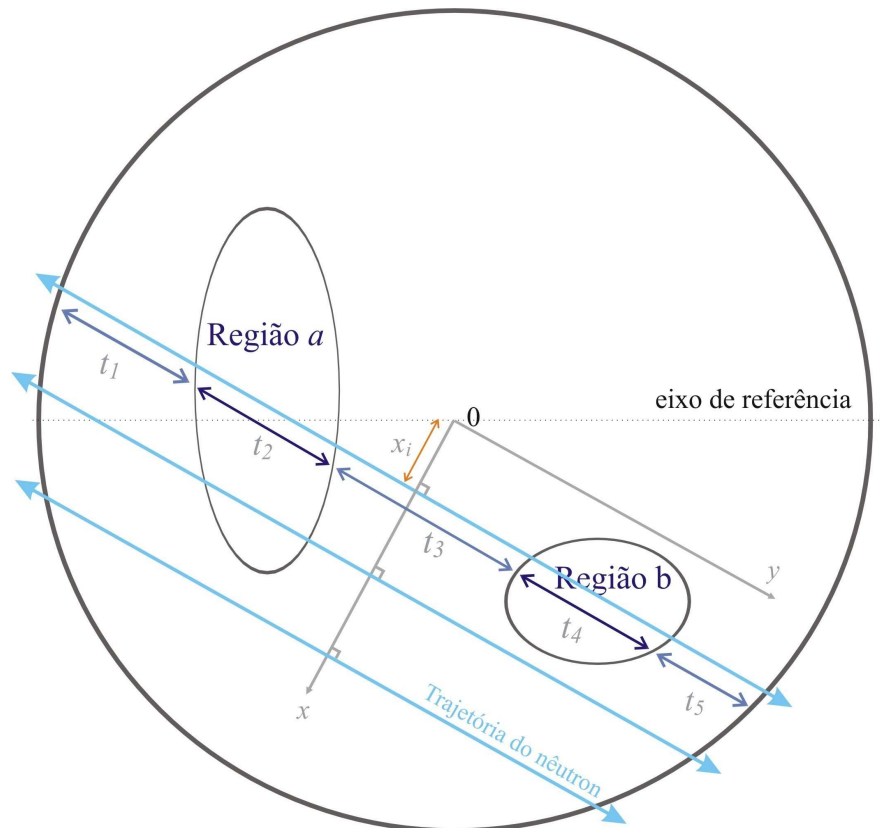


Figura 2.6 – Malhas de integração utilizadas em PIJ. Adaptado de [Bogado Leite, 2000].

Esse problema de convergência foi contornado a partir da implementação de modificações na malha e no esquema de integração resultando na sub-rotina PIJM<sup>7</sup> [Bogado Leite, 2000]. A malha passou a ser construída individualmente para cada região, Figura 2.7, evitando, assim, o excesso de linhas em algumas regiões e a falta de linhas em outras.

<sup>7</sup> Detalhada na seção 4.1.1.

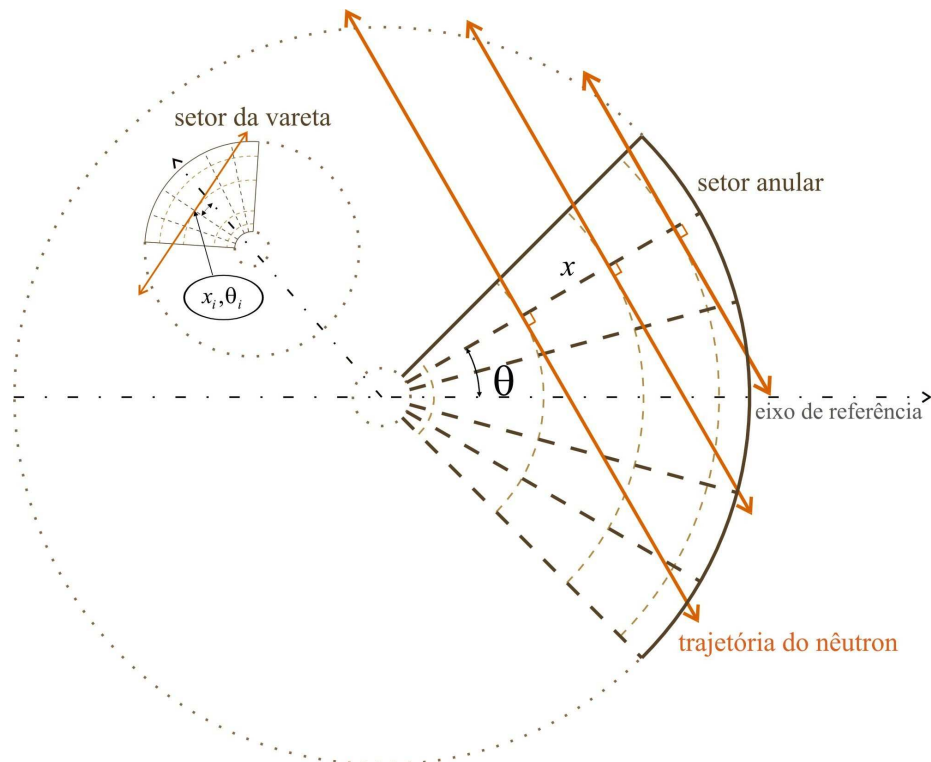


Figura 2.7 – Malhas de integração individuais utilizadas em PIJM.  
Adaptado de [Bogado Leite, 2000].

As funções de Bickley de ordem três,  $Ki_3(x)$ , passaram a ser determinadas através de uma aproximação racional de Chebyshev. Essa aproximação, combinada com a relação de recorrência, produziu um método estável de se computar  $Ki_3(x)$  para uma vasta gama de argumentos, conforme Blair et al., 1978.

As integrais duplas passaram a ser calculadas utilizando uma combinação de regra trapezoidal estendida<sup>8</sup> e quadratura de Gauss. Mantiveram-se, aproximadamente, o mesmo número de pontos de quadratura e de incremento angular. Assim, sua atribuição principal continuou sendo o cálculo das probabilidades de transmissão entre regiões, entre superfícies, entre região e superfície e vice-versa. Entretanto, utilizando uma metodologia de cálculo muito mais eficiente.

As células combustíveis reais apresentam, geralmente, seção transversal quadrada ou hexagonal. Porém, o uso de uma célula cilíndrica equivalente de mesmo volume provê, em

<sup>8</sup> Quando o intervalo de integração é grande, pode não ser conveniente aumentar o grau do polinômio interpolador para estabelecer fórmulas de integração mais precisas, uma vez que estas fórmulas tornam-se gradativamente mais complicadas com o aumento do grau do polinômio. A alternativa mais empregada neste caso é subdividir o intervalo de integração e aplicar as fórmulas já conhecidas repetidas vezes. Assim, são obtidas as fórmulas estendidas ou compostas [Gaelzer, 2011].

algumas ocasiões, simplificações consideráveis nos procedimentos envolvidos no tratamento do problema. Essa simplificação é chamada de aproximação de Wigner-Seitz<sup>9</sup>.

Todavia, sabe-se que a utilização da célula equivalente, ao invés da real, superestima a razão  $\Phi_M/\Phi_F$  e subestima a absorção no moderador como consequência da diminuição da distância média dos nêutrons oriundos do combustível até a borda. Então, Bogado Leite, 2001, implementa em PIJM a opção de considerar o contorno externo quadrado, Figura 2.8, similar àquela disponível anteriormente em PIJ. Dessa forma, as reflexões dos traços e suas respectivas contribuições são computadas explicitamente. Esse procedimento resulta na sub-rotina SQUARE<sup>10</sup>.

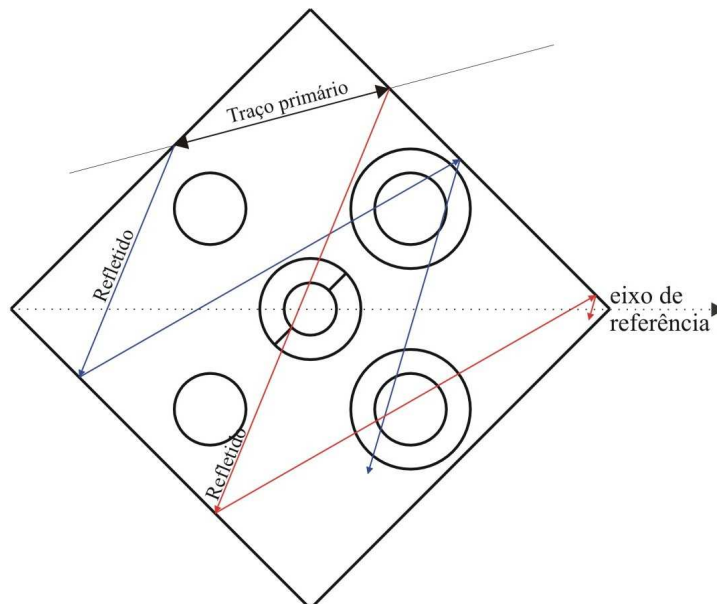


Figura 2.8 – Célula com contorno externo quadrado.  
Destaque para a reflexão especular.

No entanto, a literatura especializada apresentava valores precisos de probabilidades de escape e de colisão apenas nos casos envolvendo geometrias simples e situações idealizadas. Fez-se necessário, então, o desenvolvimento de um método independente capaz de calculá-las para casos mais gerais a fim de comparar o método original, utilizado em PIJ, e o proposto, utilizado em PIJM.

Assim, em trabalho desenvolvido por Bogado Leite, 2003, o método de Monte Carlo foi empregado para determinar probabilidades de colisão para células com contornos externos

<sup>9</sup> Demais considerações pertinentes na seção 3.4.

<sup>10</sup> Detalhada na seção 4.1.3.

quadrado e cilíndrico. Essa técnica resultou na sub-rotina PIJMC<sup>11</sup>, tornando-se mais uma alternativa de cálculo na determinação de probabilidades de colisão. Como consequência, os resultados obtidos por PIJM foram validados para qualquer tipo de célula, e PIJMC foi implementada na versão WIMS-D4 v.101 utilizada pela CNEN.

A seguir, a sub-rotina PIJM passou por novas alterações [Bogado Leite et al., 2004a]. O cálculo de fatores de Dancoff foi implementado para células cilíndricas, assumindo-se absorção total do combustível. A definição original, na qual esse fator corrige a corrente de nêutrons incidente na superfície de uma vareta combustível devido à presença de varetas vizinhas (sombreamento), foi utilizada. Esses fatores foram, então, calculados para as células combustíveis canadenses CANDU-37 e CANFLEX e para duas células em geometria *cluster* (contendo 9 e 13 varetas) a partir de um método determinístico. As integrais duplas da Equação 2.3 foram calculadas utilizando uma combinação de regra trapezoidal estendida, para a variável angular, e quadratura de Gauss, para a variável espacial.

A validação do método se deu a partir da comparação entre os dados calculados e aqueles obtidos através da rotina DASQHE [Carlvik, 1967] para as células de 9 e 13 varetas e dos cálculos utilizando Monte Carlo [Kim e Cho, 1999] para as células canadenses. A precisão dos resultados e o aumento não significativo do tempo computacional atestaram sua eficiência. Logo, surgia mais uma alternativa na determinação dos fatores de Dancoff em células combustíveis com contorno externo cilíndrico.

Dando continuidade, o programa desenvolvido anteriormente [Bogado Leite, 2003], para determinação de probabilidades de escape e colisão, foi adaptado para calcular fatores de Dancoff para absorvedores perfeitos pelo método de Monte Carlo [Bogado Leite et al., 2004b]. A sub-rotina PIJMC calculava esses fatores a partir de sua definição alternativa visando à verificação da precisão do cálculo direto nos casos mais gerais de células irregulares. A coerência entre os resultados encontrados, acrescida do fato que foram calculados por modelos independentes e usando interpretações diferentes, atestaram a capacidade das rotinas PIJM (direta) e PIJMC (probabilística) de calcular fatores de Dancoff em células cilíndricas irregulares em geometria *cluster* para o código WIMSD [Bogado Leite et al., 2004b].

Posteriormente, Sugimura e Yamamoto, 2006, desenvolvem um método para a determinação de fatores de Dancoff, para materiais totalmente absorvedores, intitulado “*Neutron current method*”, NCM. A partir de resultados de cálculos de transporte para dois

---

<sup>11</sup> Detalhada na seção 4.1.2.

problemas de fonte fixa para um grupo de energia, foram calculados fatores de Dancoff de acordo com a Equação 2.7. Como exemplos foram utilizados um sistema isolado e um arranjo de varetas.

O fator correção de Dancoff<sup>12</sup>, Equação 2.1, foi definido em termos das correntes de nêutrons, ou seja, as correntes  $I$  e  $I_0$  definidas anteriormente. Essas são independentes da intensidade da fonte nas varetas combustíveis, uma vez que o nêutron não escapa da vareta devido à sua característica de corpo negro. Dessa forma, no NCM não há fonte de nêutrons nas varetas combustíveis [Sugimura e Yamamoto, 2006]. Logo, o número de nêutrons que entram na vareta combustível é proporcional ao fluxo na vareta.

De acordo com o que foi exposto acima, a definição original pôde ser escrita a partir da Equação 2.1 como

$$C = \frac{I_0 - I}{I} = \frac{\Phi_0 - \Phi}{\Phi_0}, \quad (2.21)$$

na qual  $\Phi_0$  é o fluxo que entra pela superfície da vareta isolada num meio moderador infinito e  $\Phi$  é o fluxo que entra através de uma vareta num arranjo. Essa é a primeira equação utilizada nesse método. Por outro lado, a definição alternativa pode ser escrita como

$$C = \frac{P_{F \rightarrow F'}}{1 - P_{F \rightarrow F}} \quad (\because P_{f \rightarrow f} = P_{F \rightarrow F}). \quad (2.22)$$

na qual  $P_{f \rightarrow f}$  e  $P_{F \rightarrow F}$  são as probabilidades de colisão no sistema isolado e no arranjo de varetas, respectivamente, e os subíndices  $F$  e  $F'$  representam a vareta em questão e outra vareta qualquer, respectivamente.

A equivalência entre as duas definições é válida para um sistema composto de duas regiões: combustível e moderador. Porém, uma constante adicional para as fontes, devido às seções de choque macroscópicas diferentes nas regiões do moderador e do revestimento, se faz necessária para um sistema de três regiões: combustível, moderador e revestimento. Essa constante, utilizada na definição original, é dada por [Sugimura e Yamamoto, 2006]

---

<sup>12</sup> Denominação utilizada pelo autores Sugimura e Yamamoto, 2006.

$$\frac{S_C}{\Sigma_C} = \frac{S_M}{\Sigma_M} = \gamma = cte. \quad (2.23)$$

na qual  $S_C$  representa a intensidade da fonte no revestimento,  $S_M$  representa a intensidade da fonte no moderador e  $\Sigma_C$  e  $\Sigma_M$  são as respectivas seções de choque macroscópicas totais do revestimento e do moderador. A segunda equação utilizada no método, Equação 2.23, significa que a distribuição da fonte é constante por unidade de caminho óptico nas regiões que não são de combustível. Essa aproximação também é utilizada no método de probabilidades de colisão, sendo válida sob a aproximação NR, *Narrow Resonance*.

A metodologia utilizada por Sugimura e Yamamoto, 2006, é resumida a seguir. Em um primeiro momento, os fluxos são resolvidos através do Método das Características para a obtenção de  $\Phi_0$  e de  $\Phi$ . As hipóteses são três: não há espalhamento (as seções macroscópicas totais e de absorção são iguais em cada região), os combustíveis comportam-se como corpos negros (isto é, sua seção de choque macroscópica possui alto valor) e a intensidade da fonte fixa de nêutrons é zero nas regiões de combustível e obedece à Equação 2.23 nas demais regiões. Além disso, no sistema isolado, a região do moderador é suficientemente grande de forma que um nêutron originário da periferia não tenha efeito sobre o valor do fluxo na vareta combustível. Assim, uma vez determinados os fluxos, os fatores de Dancoff são obtidos a partir das Equações 2.7 e 2.21.

Finalmente, Jenisch Rodrigues, 2007, propõe um método direto visando ao cálculo desses fatores (assumindo absorção parcial do combustível) para o código WIMSD, resultando em mais uma modificação na sub-rotina PIJM. Como exemplo, apenas a célula canadense CANDU-37 foi utilizada. Assim, a partir da definição alternativa, foram determinados valores para as mesmas cinco posições distintas utilizadas por Fehér et al., 1994, e Kim e Cho, 1999.

Em síntese, o método consiste em, após o cálculo da matriz probabilidade de colisão para todas as regiões da célula, considerar apenas aquelas que são regiões de combustível. O fator de Dancoff (assumindo absorção parcial) da região  $a$  será dado, então, pelo somatório das probabilidades de colisão,  $P_{a \rightarrow b}$ , para um nêutron oriundo de uma região de combustível do tipo  $a$  ser absorvido em outra região combustível  $b$  sem sofrer colisão no revestimento ou no moderador. Destaca-se o tempo computacional que ficou bem abaixo do tempo gasto pelo método de Monte Carlo.

Os métodos apresentados até aqui para cálculo dos fatores de Dancoff utilizaram células combustíveis com contorno externo cilíndrico e condição de contorno *white*, o que significa assumir reflexão difusa (uniforme e isotrópica) de nêutrons no contorno da célula. Por outro lado, sabe-se que a aplicação da condição de contorno reflexiva especular, Figura 2.8, representa melhor a realidade do núcleo de um reator<sup>13</sup>.

Diante do exposto, fica evidente a necessidade de se estender o cálculo dos fatores de Dancoff para situações mais realistas. Isto é, ampliar a metodologia de cálculo direto visando abranger tanto células com contorno externo cilíndrico (seja com varetas de diâmetros diferentes ou não) quanto células com contorno externo quadrado. Em ambos os casos, podendo assumir absorção total ou parcial do combustível. Além disso, acredita-se que seja interessante avaliar quais os efeitos das variações dos fatores de Dancoff no fator de multiplicação efetivo,  $k_{eff}$ , dessas células.

---

<sup>13</sup> Maiores detalhes na seção 3.4.



### 3 ABSORÇÃO RESSONANTE EM SISTEMAS HETEROGÊNEOS

A absorção ressonante é um dos principais mecanismos de perda de nêutrons no núcleo do reator. A análise precisa dessa absorção é necessária em problemas como criticalidade, taxas de conversão e queima. Em arranjos compactos, ela é fortemente afetada pelo fator de Dancoff.

#### 3.1 Método das Probabilidades de Colisão

A absorção ressonante, em um sistema heterogêneo, é usualmente calculada pelo Método das Probabilidades de Colisão aplicado a um sistema de duas regiões: combustível e moderador. Apenas o combustível contém material absorvedor ressonante, enquanto que ambas as regiões contêm material moderador [Glasstone e Bell, 1970]. Considera-se que, dentro de cada região, as densidades e as composições são uniformes. As seções de choque macroscópicas de espalhamento dos moderadores são constantes, ou variam lentamente com a energia, enquanto que as seções de choque de absorção e de espalhamento do combustível possuem regiões de ressonâncias.

O fluxo de nêutrons, oriundo da moderação dos nêutrons da fonte a altas energias, é independente do tempo. Nesse sistema a taxa de colisão total na região do combustível é escrita como

$$V_F \Sigma_F(E) \Phi_F = [1 - P_F] V_F \left\{ \int_E^{E/\lambda_{mF}} \frac{\Sigma_{MF}^s \Phi_F}{(1 - \lambda_{mF}) E'} dE' + \int_E^{E/\lambda_{aF}} \frac{\Sigma_F^s \Phi_F}{(1 - \lambda_{aF}) E'} dE' \right\} + P_M V_M \int_E^{E/\lambda_{mM}} \frac{\Sigma_M^s \Phi_M}{(1 - \lambda_{mM}) E'} dE', \quad (3.1)$$

na qual  $V_F$  é o volume da região de combustível,  $V_M$  é o volume da região de moderação,  $\Sigma_F$  é a seção de choque macroscópica total do combustível,  $\Sigma_{MF}^s$  é a seção de choque macroscópica de espalhamento do moderador misturado ao combustível,  $\Sigma_F^s$  é a seção de choque macroscópica de espalhamento do combustível,  $\Sigma_M^s$  é a seção de choque macroscópica de espalhamento do moderador na região de moderação,  $\Phi$  é o fluxo médio de nêutrons no volume em cada região,  $P_F$  é a probabilidade de um nêutron originário da região  $F$  com

energia  $E$  sofrer sua próxima colisão em outra região,  $P_M$  é definida de forma análoga e  $\lambda$  é a energia fracional mínima de um nêutron, resultado da conservação de energia e de *momentum*, após o espalhamento elástico dada por

$$\lambda \equiv \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2, \quad (3.2)$$

na qual  $A$  é o número de massa do núcleo alvo da na colisão. Assim, os termos  $\lambda_{mF}$ ,  $\lambda_{aF}$  e  $\lambda_{mM}$  são, respectivamente, a energia fracional mínima do moderador da região  $F$ , a energia fracional mínima do absorvedor da região  $F$  e a energia fracional mínima do moderador da região  $M$ . A Equação 3.1 é conhecida como a equação de balanço fundamental para computar a absorção ressonante em sistemas heterogêneos. Obtêm-se a equação para sistemas homogêneos tomando-se  $P_F$  e  $V_M$  iguais a zero. Embora seja uma equação exata, algumas aproximações são necessárias na derivação das probabilidades de colisão.

A distribuição dos nêutrons, em grande parte dos sistemas heterogêneos (pelo menos para aqueles com energias distantes dos picos de ressonância), é independente da posição em cada região. Logo, pode se utilizar o postulado de fonte planar para a determinação de  $P_F(E)$  e  $P_M(E)$ . Nessa aproximação,  $P_F(E)$  e  $P_M(E)$  são obtidas para fontes de nêutrons espacialmente constantes em cada região, ou seja, assume-se que o sistema possui uma fonte planar ou um fluxo sem “perturbações”. Nesse caso, cada colisão remove um nêutron da energia  $E$  devido a uma absorção ou a um espalhamento.

Para problemas envolvendo apenas um grupo de energia, a probabilidade  $P_F(E)$  é equivalente à probabilidade de um nêutron originário do combustível sofrer sua próxima colisão no moderador,  $P_{F \rightarrow M}$ , e  $P_M(E)$  é equivalente à probabilidade de um nêutron originário do moderador sofrer sua próxima colisão no combustível,  $P_{M \rightarrow F}$ . De acordo com a relação geral de reciprocidade, a taxa de nêutrons absorvidos em  $V_F$ , devido a uma fonte unitária uniforme em  $V_M$ , é também a probabilidade que um nêutron produzido uniformemente em  $V_M$  seja absorvido em  $V_F$ . No presente caso, tem-se que

$$\sum_M^s V_M P_M = \sum_F V_F P_F. \quad (3.3)$$

As regiões  $V_F$  e  $V_M$  não precisam ser convexas desde que estejam sempre rodeadas por uma superfície livre convexa [Glasstone e Bell, 1970]. A partir dessa relação é possível isolar a

probabilidade  $P_M$  e substituí-la na Equação 3.1. Consequentemente, ela se torna função apenas de  $P_F$ ,

$$\begin{aligned} \Sigma_F \Phi_F = [1 - P_F] & \left\{ \int_E^{E/\lambda_{mF}} \frac{\Sigma_{MF}^s \Phi_F}{(1 - \lambda_{mF}) E'} dE' + \int_E^{E/\lambda_a} \frac{\Sigma_F^s \Phi_F}{(1 - \lambda_{aF}) E'} dE' \right\} \\ & + \Sigma_F P_F \int_E^{E/\lambda_{mM}} \frac{\Phi_M}{(1 - \lambda_{mM}) E'} dE'. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Ambas as integrais do moderador na Equação 3.4, a primeira e a terceira, são dominadas por contribuições que estão longe o suficiente do pico de ressonância, o qual depende do material e da energia do combustível em questão. Dessa forma, o fluxo não é significativamente perturbado por ela.

A aproximação NR negligencia o efeito da ressonância no fluxo nas integrais. Sendo o termo  $(1 - \lambda_m)$  muito maior que o termo  $(1 - \lambda_a)$ , pois o absorvedor é muito mais “pesado”, a aproximação NR torna-se, então, uma opção apropriada para o moderador. Se as ressonâncias estão bem separadas, é razoável assumir que outras ressonâncias não afetarão a integral. A aproximação de recuperação de fluxo negligencia o efeito dessas outras ressonâncias de forma que o fluxo assume um valor assintótico entre as mesmas [Glasstone e Bell, 1970]. Usando-se essas duas aproximações, o fluxo pode ser expresso de forma assintótica na primeira integral

$$\int_E^{E/\lambda_{mF}} \frac{\Sigma_{MF}^s \Phi_F}{(1 - \lambda_{mF}) E'} dE' = \Sigma_{MF}^s \frac{1}{E}, \quad (3.5)$$

e na terceira integral

$$\int_E^{E/\lambda_{mM}} \frac{\Phi_M}{(1 - \lambda_{mM}) E'} dE' = \frac{1}{E}. \quad (3.6)$$

Consequentemente, a Equação 3.1 pode ser reescrita como

$$\Sigma_F \Phi_F = (1 - P_F) \int_E^{E/\lambda_{aF}} \frac{\Sigma_F^s \Phi_F}{(1 - \lambda_{aF}) E'} dE' + \frac{1}{E} \left[ \Sigma_{MF}^s + P_F (\Sigma_F^s + \Sigma_F^a) \right]. \quad (3.7)$$

Para o caso simples de uma única vareta imersa num meio moderador infinito,  $P_F$  é equivalente à probabilidade de escape do combustível,  $P_0$ . Entretanto, se a região do combustível assume uma geometria mais complicada, por exemplo, um arranjo de varetas, a probabilidade de escape,  $P_F$ , deve ser modificada por uma correção,

$$P_F = P_0(1 - C), \quad (3.8)$$

na qual  $C$  é o fator de Dancoff. Uma vez que tenham sido determinados os valores de  $P_F$ , a Equação 3.7 pode ser resolvida numericamente visando à determinação do fluxo. Em seguida, as taxas de reações e a seção de choque efetiva podem ser computadas.

### 3.2 Probabilidades de Colisão

Sejam duas regiões  $a$  e  $b$  infinitas na direção axial contidas numa célula unitária de contorno externo cilíndrico, Figura 3.1. O segmento  $\overline{A'H'}$  passa por  $D$  atravessando ambas as regiões, sendo identificado pelas coordenadas  $x$ ,  $\phi$  e pelo ângulo  $\theta$  que faz com a direção axial, Figura 3.1 (seção transversal) e Figura 3.2 (seção longitudinal). Localizado em  $D$  tem-se um elemento de volume  $dx dy dz$  com coordenadas  $(x, y, z)$  disposto dentro da região  $a$ . Assume-se que essa região emite nêutrons uniformemente e isotropicamente no interior à taxa de um nêutron por segundo.

Então, a taxa de emissão do elemento de volume dentro do elemento de ângulo sólido sobre a linha  $\overline{DH'}$  é dada por

$$d\Omega_R = \frac{\text{sen } \theta d\theta d\phi dx dy}{4\pi V_a}, \quad (3.9)$$

na qual  $\text{sen } \theta d\theta d\phi$  é o elemento de ângulo sólido,  $dx dy$  é o elemento de volume por unidade de altura e  $V_a$  é o volume da região  $a$  por unidade de altura. Acompanhando-se os nêutrons ao longo da trajetória  $\overline{DH'}$  pode-se escrever a probabilidade de colidirem na região  $b$  como

$$P_b \propto \exp(-T(DC')) \exp(-T(C'F')) (1 - \exp(F'G')), \quad (3.10)$$

na qual  $T(DC')$  é a distância óptica de  $D$  a  $C'$ ,  $T(C'F')$  é a distância óptica de  $C'$  a  $F'$  e  $T(F'G')$  é a distância óptica de  $F'$  a  $G'$ . De forma análoga, pode-se escrever a probabilidade de colidirem na região  $a$  como

$$P_a \propto 1 - \exp(-T(DC')). \quad (3.11)$$

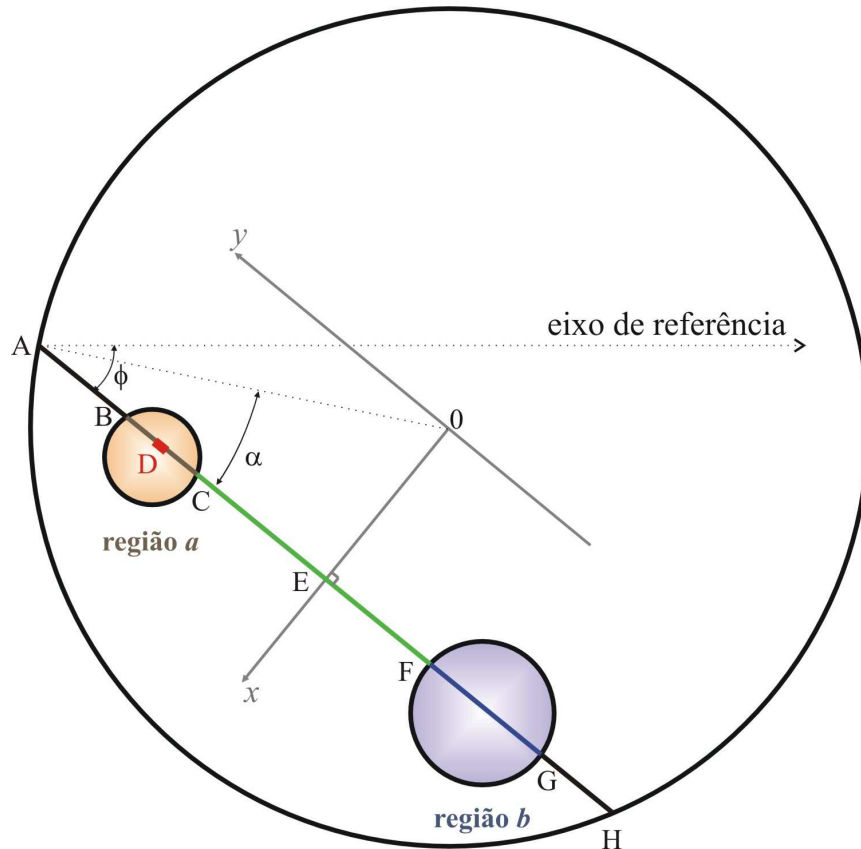


Figura 3.1 – Seção transversal (plano  $xy$ ) de uma célula combustível com contorno externo cilíndrico. Em destaque as regiões  $a$  e  $b$  e o ponto  $D$ . Adaptado de [Anderson, 1973]

A projeção da distância óptica no plano  $xy$ ,  $\tau$ , é definida como

$$\tau = \int \Sigma(y) dy, \quad (3.12)$$

na qual  $\Sigma(y)$  é a seção de choque macroscópica total da região em função da distância  $y$ . No caso em consideração, essa seção de choque é constante ao longo de cada região. Assim, a Equação 3.12 é reescrita como



na qual  $\Sigma$  é a seção de choque macroscópica total associada às regiões e  $t$  são as projeções no plano  $xy$  (segmentos  $\overline{FG}$  e  $\overline{CF}$ ) das distâncias geométricas associadas à região  $b$  ( $t_b$ ) e ao meio ( $t^*$ ) entre as regiões  $a$  e  $b$ , respectivamente, conforme Figura 3.2.

As duas equações anteriores aplicam-se às trajetórias que interceptam as regiões uma única vez, caso contrário seria necessário computar contribuições semelhantes. Multiplicando-as pela Equação 3.9 obtêm-se a fração de nêutrons emitidos da região  $a$  que colidem na região  $b$  ou na própria região  $a$ . A integração em  $y$  (entre os limites  $\overline{EB}$  e  $\overline{EC}$ ) conduz às contribuições para as probabilidades de nêutrons descrevendo uma trajetória na direção  $(\theta, \phi)$  do elemento retangular de comprimento  $t_a$  e largura  $dx$ . Consequentemente, para  $P_{a \rightarrow b}$  tem-se que

$$dP_{a \rightarrow b} \propto \left( \frac{\text{sen}^2 \theta d\theta d\phi dx}{4\pi \Sigma_a V_a} \right) \left[ \exp\left(-\tau_a / \text{sen} \theta\right) \exp\left(-\tau^* / \text{sen} \theta\right) \left(1 - \exp\left(-\tau_b / \text{sen} \theta\right)\right) \right], \quad (3.16)$$

na qual  $\tau$  são as projeções das distâncias ópticas no plano  $xy$  associadas às regiões em questão, definidas pela Equação 3.13,  $\Sigma_a$  é a seção de choque total média da região  $a$  e  $V_a$  é o volume por unidade de altura da região  $a$ . Para  $P'_{a \rightarrow a}$  tem-se

$$dP_{a \rightarrow a} \propto \left( \frac{\text{sen} \theta d\theta d\phi dx}{4\pi V_a} \right) \left[ t_a - \frac{\text{sen} \theta}{\Sigma_a} \exp\left(-\tau_a / \text{sen} \theta\right) \right], \quad (3.17)$$

na qual  $t_a$  é projeção no plano  $xy$  da distância geométrica percorrida sobre a região  $a$ , segmento  $\overline{BC}$ , Figura 3.2.

As probabilidades totais são determinadas a partir da integração das Equações 3.16 e 3.17 em relação a  $\theta, \phi$  e  $x$ . Consequentemente,

$$P_{a \rightarrow b} = \frac{1}{4\pi \Sigma_a V_a} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_0^{\pi} \left[ \left(1 - \exp\left(-\tau_a / \text{sen} \theta\right)\right) \exp\left(-\tau^* / \text{sen} \theta\right) \left(1 - \exp\left(-\tau_b / \text{sen} \theta\right)\right) \right] \text{sen}^2 \theta d\theta \quad (3.18)$$

e

$$P'_{a \rightarrow a} = \frac{1}{4\pi V_a} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} t_a dx \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta - \frac{1}{4\pi \Sigma_a V_a} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} t_a dx \int_0^{\pi} \left[ 1 - \exp\left(-\tau_a / \sin \theta\right) \right] \sin^2 \theta d\theta. \quad (3.19)$$

A partir da definição das funções de Bickley de ordem três, Equação 2.4, tem-se que

$$Ki_3(\tau) = \int_0^{\pi/2} \exp\left(-\tau / \sin \theta\right) \sin^2 \theta d\theta. \quad (3.20)$$

Dessa forma, pode-se escrever as integrais em  $\theta$  das Equações 3.18 e 3.19 em termos da Equação 3.20. Logo, a probabilidade de um nêutron emitido uniformemente e isotropicamente na região  $a$  colidir na região  $b$  é dada por

$$P_{a \rightarrow b} = \frac{1}{2\pi \Sigma_a V_a} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} [Ki_3(\tau_a + \tau^* + \tau_b) + Ki_3(\tau^*) - Ki_3(\tau_a + \tau^*) - Ki_3(\tau_b + \tau^*)] dx, \quad (3.21)$$

e a probabilidade de um nêutron emitido uniformemente e isotropicamente na região  $a$  colidir na própria região  $a$  é dada por

$$P'_{a \rightarrow a} = 1 - \frac{1}{2\pi \Sigma_a V_a} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} [Ki_3(0) - Ki_3(\tau_a)] dx. \quad (3.22)$$

As equações acima definem as probabilidades de colisão entre regiões em termos das funções de Bickley de ordem três para várias combinações de projeções de distâncias ópticas do sistema. Assume-se que as trajetórias são descritas pelos nêutrons apenas em uma direção ao longo de cada segmento. Aquelas descritas na direção contrária também são computadas, já que os limites de integração de  $x$  e de  $\phi$  se estendem de  $-\infty$  a  $+\infty$  e de 0 a  $2\pi$ , respectivamente. Devido à geometria do sistema e à localização do eixo de coordenadas no seu centro ( $x = 0$ ), o intervalo de integração para a variável  $x$  pode ser reduzido para  $0 \leq x \leq r$ , onde  $r$  é o raio externo da célula.



### 3.3 Fatores de Dancoff

Em sua definição original, o fator de Dancoff corrige a corrente de nêutrons incidente na superfície de uma vareta combustível devido ao sombreamento ocasionado pelas demais varetas do arranjo, Equação 2.1. Alternativamente, pode ser interpretado como uma correção na probabilidade de escape do combustível devido às varetas vizinhas. Para absorvedores perfeitos, essas definições são equivalentes [Carlvik, 1967], entretanto para materiais parcialmente absorvedores essa equivalência não se mantém.

#### 3.3.1 *Black Dancoff factors* – materiais totalmente absorvedores

No caso de um absorvedor perfeito (corpo negro), imerso num meio homogêneo infinito com uma fonte de densidade constante, o fator de Dancoff mede o quanto a corrente de nêutrons, que entra através da superfície desse absorvedor, é reduzida devido ao sombreamento ocasionado pelos corpos negros adjacentes. Originalmente, no trabalho desenvolvido por Dancoff e Ginsburg, 1944, esse fator foi determinado para um sistema contendo duas varetas paralelas. Todos os cálculos determinísticos para o fator de Dancoff para elementos de combustível cilíndricos usam uma integração analítica sobre o ângulo  $\theta$  entre a direção de migração e o eixo axial  $z$ , resultando numa função de Bickley de ordem três [Fehér et al., 1994]. A relação para um caso geral será derivada nesta seção.

Na seção anterior, foi apresentada a derivação das probabilidades de colisão entre regiões. O cálculo foi feito a partir de um elemento de volume dentro de um elemento de ângulo azimutal sobre uma determinada trajetória linear. A seguir, apresenta-se um raciocínio semelhante o qual conduz ao mesmo resultado. Entretanto, esta metodologia mostra-se mais apropriada, uma vez que as derivações intermediárias requeridas podem ser tratadas com maior rapidez. O primeiro procedimento será eliminar a coordenada axial do problema.

A fração de nêutrons que escapam de uma região  $j$  qualquer, em um elemento de ângulo sólido  $\text{sen}\theta d\theta d\phi$ , é dada por

$$\exp\left(\frac{-\sum_j t_j}{\text{sen}\theta}\right) = \exp\left(\frac{-\tau_j}{\text{sen}\theta}\right). \quad (3.23)$$

Esses nêutrons são emitidos isotropicamente num pequeno ângulo azimutal  $d\phi$ , descrevendo, sobre a região  $j$ , uma trajetória cuja distância óptica projetada no plano  $xy$  é  $\tau_j$ , Figura 3.3. Assim, a probabilidade desses nêutrons não colidirem na região  $j$  será dada a partir da razão entre a integração em  $\theta$  da Equação 3.23 e o ângulo sólido total,  $2d\phi$ , ou seja,

$$P(\tau_j) = \frac{1}{2d\phi} \int_0^\pi \exp\left(\frac{-\tau_j}{\text{sen}\theta}\right) \text{sen}\theta d\theta d\phi. \quad (3.24)$$

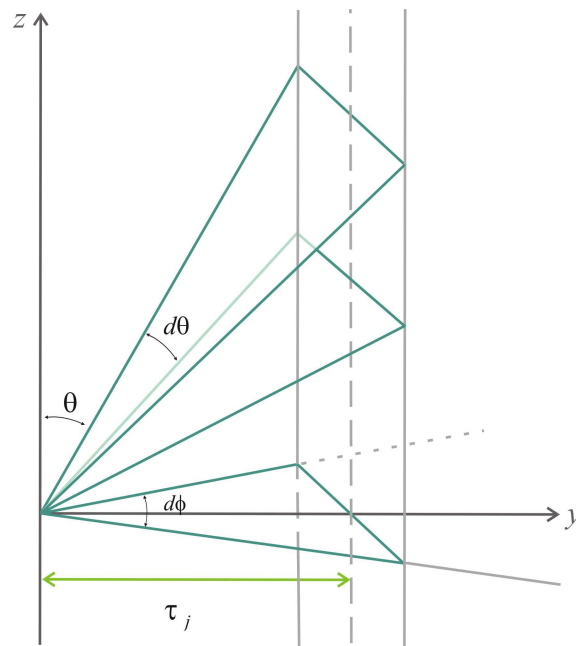


Figura 3.3 – Eliminação da coordenada  $z$  num sistema de geometria cilíndrica. Adaptado de [Carlvik, 1965].

A função de Bickley de ordem dois é definida por

$$Ki_2(\tau_j) = \int_0^{\pi/2} \exp\left(\frac{-\tau_j}{\text{sen}\theta}\right) \text{sen}\theta d\theta. \quad (3.25)$$

Logo, a probabilidade de nêutrons emitidos isotropicamente e uniformemente numa região cilíndrica homogênea sofrerem sua primeira colisão em outra região, Equação 3.24, pode ser escrita como [Carlvik, 1965]



$$I \propto \frac{1}{c} \int_b^c Ki_2[\Sigma^*(c-x)]dx. \quad (3.28)$$

Caso o corpo  $j$ , responsável pelo sombreamento, não existisse, ou seja, a vareta estivesse isolada, a corrente seria proporcional a

$$I_0 \propto \frac{1}{c} \int_0^c Ki_2[\Sigma^*(c-x)]dx. \quad (3.29)$$

As Equações 3.28 e 3.29 são integradas em relação a  $x$ , chegando-se a

$$I \propto \frac{1}{\Sigma^*c} \left[ \frac{\pi}{4} - Ki_3(\tau^*) \right] \quad (3.30)$$

e

$$I_0 \propto \frac{1}{\Sigma^*c} \frac{\pi}{4}. \quad (3.31)$$

As correntes totais entrando através da superfície  $i$  são obtidas multiplicando-se as Equações 3.30 e 3.31 por  $c(y,\alpha)dyd\alpha$ , integrando-se sobre  $y$  e  $\alpha$  e dividindo-se por

$$\hat{J} = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} cdy. \quad (3.32)$$

Os limites de integração para  $y$  são 0 e  $p(\alpha)$ , enquanto que os limites para  $\alpha$  são 0 e  $2\pi$ . A partir da definição dada pela Equação 2.1, tem-se que

$$C = 1 - \frac{I}{I_0} = 1 - \frac{\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} \frac{1}{\Sigma^*c} \left[ \frac{\pi}{4} - Ki_3(\tau^*) \right] cdy}{\frac{\pi}{4} \frac{1}{\Sigma^*c} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} cdy}. \quad (3.33)$$

Usando-se a relação dada por

$$\int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} dy = 2S, \quad (3.34)$$

na qual  $S$  é a superfície por unidade de comprimento do corpo  $i$ , chega-se à

$$C = \frac{2}{\pi S} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{p(\alpha)} Ki_3(\tau^*) dy. \quad (3.35a)$$

Para o caso de uma vareta combustível com contorno externo cilíndrico, o fator de Dancoff em sua formulação geral, Equação 3.35a, pode ser escrito, a partir das Equações 2.1 e 2.3, como

$$C = 1 - \frac{I}{I_0} = \frac{1}{\pi^2 r} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_{-r}^r Ki_3[\tau(\alpha, y)] dy, \quad (3.35b)$$

na qual  $r$  é o raio da vareta,  $\tau$  é a espessura óptica entre as varetas, caracterizada pela distância mínima da projeção da trajetória do nêutron em relação ao centro da célula ( $y$ ) e pelo ângulo que este faz com o eixo de referência ( $\alpha$ ) e  $Ki_3(\tau)$  é a função de Bickley de ordem três.

### 3.3.2 Grey Dancoff factors – materiais parcialmente absorvedores

Para sistemas com absorção parcial, a interpretação original não mais se aplica. Nesse caso, deve-se utilizar a definição apropriada em termos de probabilidades de escape e de colisão. A partir da Equação 3.8, temos que o fator de Dancoff pode ser escrito como

$$C = \frac{P_0 - P_F}{P_0}, \quad (3.36)$$

na qual  $P_0$  é a probabilidade de escape do combustível e  $P_F$  é a probabilidade de um nêutron, oriundo de uma região de combustível, sofrer sua próxima colisão no moderador. Para um

sistema composto por uma vareta e um meio moderador infinito essas probabilidades são equivalentes.

Porém, numa célula contendo várias varetas combustíveis, a probabilidade de um nêutron escapando isotropicamente do combustível  $a$  ter sua próxima colisão num combustível  $b$ ,  $P_{a \rightarrow b}$ , é dada pelo somatório sobre todos os combustíveis da célula, inclusive para  $b = a$ . Portanto, a probabilidade  $P_F$ , de colisão no moderador, da Equação 3.36 pode ser escrita como

$$P_F = 1 - \sum_b P_{a \rightarrow b} . \quad (3.37)$$

Sendo o combustível em questão do tipo  $a$ , e definindo  $P'_{a \rightarrow a}$  como a probabilidade de autocolisão do nêutron na própria vareta  $a$ , então se escreve a probabilidade  $P_0$  como

$$P_0 = 1 - P'_{a \rightarrow a} . \quad (3.38)$$

A probabilidade de autocolisão,  $P'_{a \rightarrow a}$ , não é necessariamente igual à probabilidade de colisão numa outra vareta do tipo  $a$ ,  $P_{a \rightarrow a}$ . Substituindo as relações acima na Equação 3.36 temos que o fator de Dancoff,  $C_a$ , para uma vareta do tipo  $a$  é dado por

$$C_a = \frac{\left( \sum_a P_{a \rightarrow b} - P'_{a \rightarrow a} \right)}{1 - P'_{a \rightarrow a}} . \quad (3.39)$$

### 3.4 A Aproximação de Wigner-Seitz

Na maioria dos reatores, os elementos combustíveis estão dispostos em arranjos periódicos. Assim, pelo menos a parte mais central do núcleo pode ser tratada como sendo constituída de células unitárias idênticas. Entretanto, mesmo para elementos cilíndricos, surgem problemas de geometria. Isso porque as bordas não são realmente cilíndricas, mas quadradas ou hexagonais. Para simplificar o problema, assume-se, primeiramente, que a célula é infinitamente longa. Essa é uma boa aproximação desde que a razão entre o comprimento e o diâmetro da célula unitária seja invariavelmente grande. Num segundo

momento, é usualmente assumido que a borda da célula real pode ser substituída por uma borda cilíndrica de forma que o volume total se mantenha, Figura 3.5. Essa hipótese é, muitas vezes, chamada de aproximação de Wigner-Seitz.

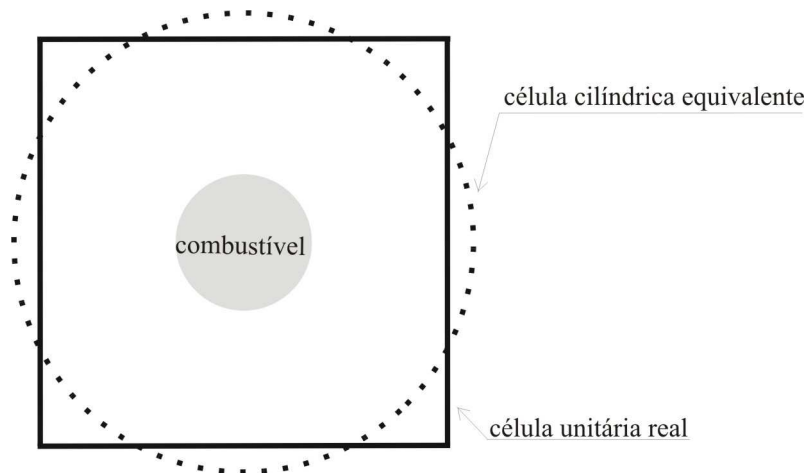


Figura 3.5 – Equivalência entre as células combustíveis unitárias [Glasstone e Bell, 1970].

A condição de contorno aplicada na superfície externa cilindrizada especifica como é tratada a relação entre os nêutrons que saem e entram por essa superfície. Dentre as diversas condições de contorno aplicáveis utilizam-se, neste trabalho, as condições de contorno *white* e reflexiva. Na condição *white*, ou de reflexão difusa, os nêutrons entram uniformemente e isotropicamente através da superfície externa da célula e o número de nêutrons que saem é igual ao número de nêutrons que entram. Nesse caso, o nêutron incidente na borda pode geralmente ser refletido de maneira que sua trajetória não intercepte o elemento combustível, Figura 3.6(a), a menos que seja espalhado no moderador.

Por outro lado, na condição de reflexão especular, o nêutron que sai através da superfície externa corresponde a um nêutron que entra com mesmo ângulo em relação à normal a essa superfície. Então, numa célula real, Figura 3.6(b), os nêutrons “refletidos” na borda podem entrar no combustível mesmo sem espalhamento. O uso da célula equivalente ao invés da real superestima a razão  $\Phi_M/\Phi_F$  e subestima a absorção no moderador como consequência da diminuição da distância média dos nêutrons oriundos do combustível até o contorno da célula [Halsall, 1980].

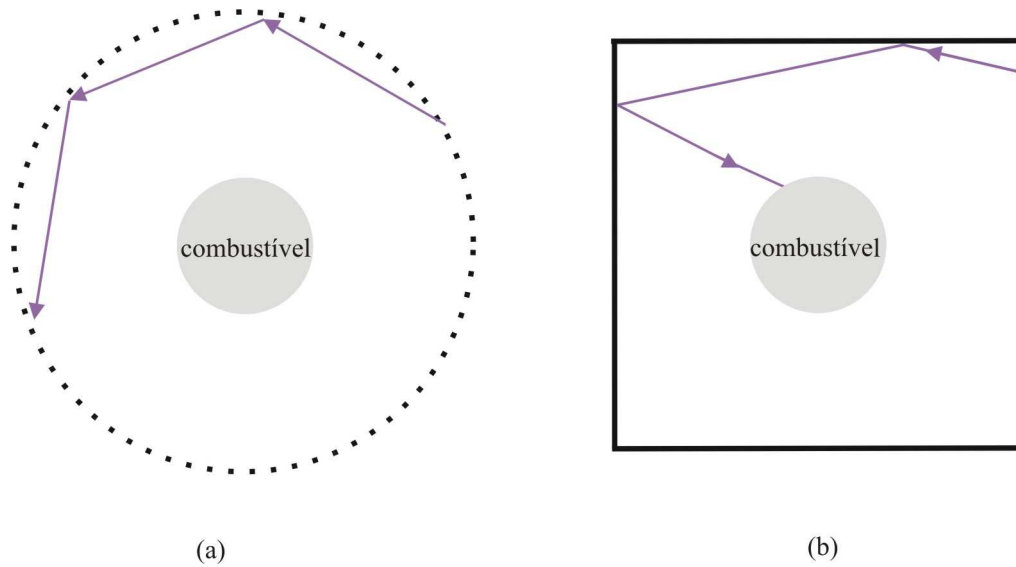


Figura 3.6 – Trajetórias típicas para um nêutron numa célula cilíndrica equivalente (a) e numa célula real (b) [Glasstone e Bell, 1970].

Portanto, nos casos envolvendo células cilíndricas, a condição de contorno utilizada é a condição de reflexão difusa. Ou seja, assume-se que os nêutrons que saem pela superfície externa da célula retornam uniformemente e isotropicamente distribuídos para dentro da célula. Nos casos envolvendo células com contorno externo quadrado, a condição de contorno utilizada é de reflexão especular dos nêutrons nas bordas.

### 3.5 O Fator de Multiplicação Efetivo – $k_{eff}$

No âmbito da física de reatores, existe um número fundamental na modelagem matemática dos fenômenos que ocorrem no interior de um reator nuclear. Esse número é denominado fator de multiplicação efetivo,  $k_{eff}$ . Esse fator é definido como a razão entre o número total de nêutrons produzidos em um dado intervalo de tempo, em um meio multiplicador finito, e o número total de nêutrons (térmicos + rápidos) perdidos por absorção ou fuga, nesse mesmo intervalo de tempo. Isto é, esse fator pode ser escrito em termos da razão entre a taxa de produção e a taxa de remoção de nêutrons no reator [Duderstadt e Hamilton, 1942]

$$k \equiv \frac{\text{taxa de produção de nêutrons no reator}}{\text{taxa de remoção (absorção + captura) de nêutrons no reator}}. \quad (3.40)$$



Por outro lado, para se propagar uma cadeia de reações de fissão, Figura 3.7, usa-se o nêutron como o condutor da mesma. Esse se originou de uma fissão anterior e sofrerá espalhamento até ser absorvido ou escapar do reator. Caso seja absorvido, uma nova geração de nêutrons será produzida. Assim, também se pode definir o fator de multiplicação,  $k$ , em termos de gerações sucessivas de nêutrons. Isto é, como sendo a razão entre uma geração de nêutrons e sua precedente [Duderstadt e Hamilton, 1942]

$$k \equiv \frac{\text{número de nêutrons em uma geração}}{\text{número de nêutrons na geração precedente}}. \quad (3.41)$$

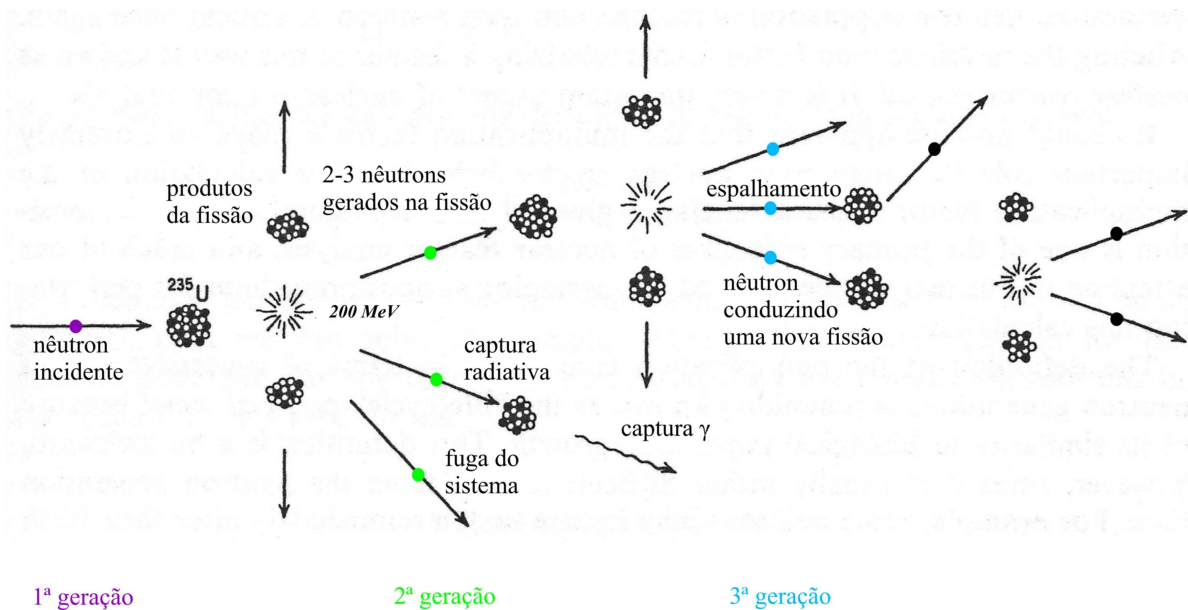


Figura 3.7 – Esquema simplificado de uma reação em cadeia. Adaptado de [Duderstadt e Hamilton, 1942]

Os cálculos formais do fator de multiplicação para reatores nucleares do tipo térmico, isto é, reatores onde o processo de reações de fissão em cadeia ocorre com nêutrons com baixa energia serão apresentados a seguir. Para tanto, utilizar-se-á uma metodologia semelhante àquela usada em Duderstadt e Hamilton, 1942. Essa se baseia em “seguir o ciclo do nêutron”, Figura 3.8, utilizando certas probabilidades para determinar esse fator.

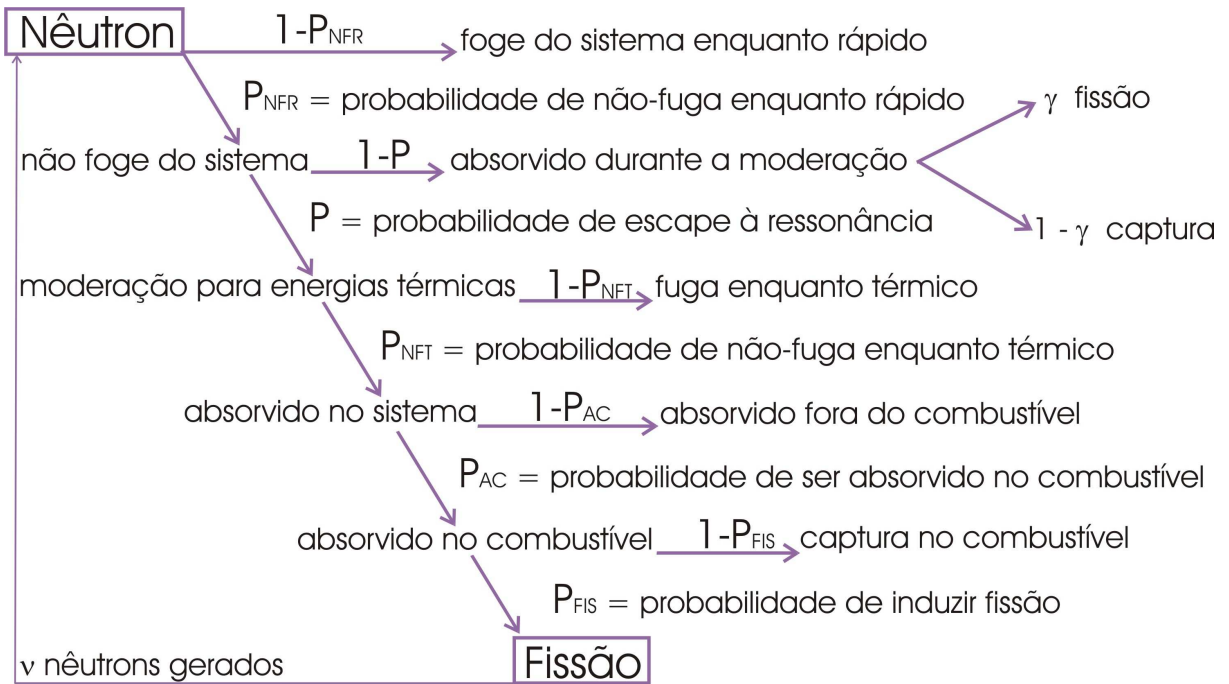


Figura 3.8 – Ciclo do nêutron em função dos parâmetros utilizados para a determinação do fator de multiplicação efetivo [Barros, 2007].

Assumindo-se que  $N_1$  representa o número de nêutrons em uma geração e  $N_2$  representa o número de nêutrons na geração seguinte, tem-se

$$N_2 = vP_{NFR}PP_{NFT}P_{AC}P_{FIS}N_1 + P_{NFR}(1-P)\gamma N_1, \quad (3.42)$$

na qual o termo à esquerda da adição representa o número de nêutrons gerados por fissão térmica e o termo à direita da adição representa o número de nêutrons gerados por fissão rápida. O fator de multiplicação é dado pela razão entre as duas gerações de nêutrons, logo

$$k = \frac{N_2}{N_1} = vP_{NFR}PP_{NFT}P_{AC}P_{FIS} + P_{NFR}(1-P)\gamma. \quad (3.43)$$

Entretanto, a probabilidade de um nêutron induzir uma reação de fissão pode ser escrita em termos de seções de choque microscópicas de fissão e absorção de forma que

$$P_{FIS} = \frac{\sigma_F^f}{\sigma_F^a} \therefore vP_{FIS} = v \frac{\sigma_F^f}{\sigma_F^a} = \eta, \quad (3.44)$$

na qual  $\sigma_F^f$  é a seção de choque microscópica de fissão,  $\sigma_F^a$  é a seção de choque microscópica de absorção (ambas do material combustível),  $\nu$  é o número de nêutrons gerados e, conseqüentemente,  $\eta$  é o número de nêutrons produzidos por absorção no combustível. Além disso, se o reator possuir uma composição uniforme, a probabilidade do nêutron ser absorvido no combustível pode ser escrita como a razão entre a seção de choque macroscópica de absorção do combustível e a soma desta com a seção de choque de absorção do resto do material presente no núcleo [Duderstadt e Hamilton, 1942], ou seja,

$$P_{AC} = \frac{\Sigma_F^a}{\Sigma_F^a + \Sigma_{Nc}^a} = f, \quad (3.45)$$

na qual  $\Sigma_F^a$  é seção de choque macroscópica de absorção do combustível,  $\Sigma_{Nc}^a$  é seção de choque macroscópica de absorção do resto do material presente no núcleo e  $f$  é definido como o fator de utilização térmica. Esse fator indica a eficiência com a qual o reator utiliza os nêutrons térmicos no combustível. Portanto, substituindo-se as Equações 3.44 e 3.45 na Equação 3.43, tem-se que

$$k = P_{NFR} P P_{NFT} f \eta + P_{NFR} (1 - P) \gamma. \quad (3.46)$$

Rearranjando algebricamente a Equação 3.46 acima, chega-se à seguinte relação

$$k = P_{NFR} P P_{NFT} f \eta \left[ \frac{P_{NFR} P P_{NFT} f \eta + P_{NFR} (1 - P) \gamma}{P_{NFR} P P_{NFT} f \eta} \right]. \quad (3.47)$$

Nesse momento, define-se a quantidade  $\varepsilon$ , fator de fissão rápida, como sendo a razão entre o número possível de nêutrons rápidos provenientes de fissão rápida e térmica e o número possível de nêutrons rápidos provenientes de fissão térmica. Então, chega-se à equação conhecida como a fórmula dos seis fatores

$$k = P_{NFR} P P_{NFT} f \eta \varepsilon, \quad (3.48)$$

na qual  $P_{NFR}$  é a fração de nêutrons rápidos que não escapam do núcleo do reator,  $P$  é a fração de nêutrons que não são absorvidos em ressonâncias (ou seja, a probabilidade de escape à

ressonância),  $P_{NFT}$  é a fração de nêutrons térmicos que não escapam do núcleo do reator,  $f$  é o fator de utilização térmica (fração de nêutrons térmicos absorvidos no combustível), e  $\eta$  é o número médio de nêutrons produzidos por cada nêutron térmico capturado no combustível e  $\epsilon$  é fator de fissão rápida. Para um meio multiplicativo infinito não há fuga de nêutrons, portanto

$$P_{NFR} = P_{NFT} = 1. \quad (3.49)$$

Logo,

$$k_{\infty} = PP_{AC}\eta\epsilon, \quad (3.50)$$

a qual é conhecida como a fórmula dos quatro fatores e  $k_{\infty}$  é denominado o fator de multiplicação para meio infinito.

As probabilidades de não-fuga do reator,  $P_{NFR}$  e  $P_{NFT}$ , podem ser modificadas fazendo-se com que o núcleo do reator seja de grande porte ou circundando-se o mesmo com um material cuja seção de choque de espalhamento seja consideravelmente grande. Assim, garante-se que alguns dos nêutrons que fugiriam do núcleo podem ser espalhados de volta ao reator. De fato, quando se altera a fuga, conseqüentemente, se modificam alguns parâmetros da fórmula de quatro fatores, uma vez que esses representam as médias sobre as energias dos nêutrons no reator e essa distribuição de energia varia com a quantidade de fugas. Tais considerações têm dado origem a uma notação um pouco diferente para o fator de multiplicação, que caracteriza um sistema finito, a qual é ocasionalmente referida como fator de multiplicação efetivo e indicada por  $k_{eff}$  [Duderstadt e Hamilton, 1942]

$$k_{eff} = k_{\infty}P_{NFR}P_{NFT}. \quad (3.51)$$

Rememorando, o fator de multiplicação é de suma importância em cálculos globais de reatores nucleares, tanto no projeto do núcleo quanto na operação do reator. Para que a reação de fissão em cadeia se mantenha estável, deve-se projetar o reator de modo que haja um balanço entre a produção de nêutrons, através da fissão, e a remoção deles, através da captura radiativa e da fuga. Quantificando, têm-se três possibilidades para esse fator:  $k = 1$ ,  $k < 1$  e  $k > 1$ .

No caso onde  $k = 1$ , tem-se que o número de nêutrons oriundos de duas gerações consecutivas é o mesmo e, conseqüentemente, a reação em cadeia é independente do tempo. Logo, o número de nêutrons no núcleo do reator não se altera. O sistema assim caracterizado é dito crítico. Essa deve ser a condição de funcionamento do reator, condição de criticalidade. Entretanto, se  $k < 1$ , tem-se que o número de nêutrons da geração anterior é maior que o da geração atual. Ou seja, o número de nêutrons decresce de geração para geração e a reação tende a se anular. Esse sistema, denominado subcrítico, já não é mais independente do tempo. Finalmente, se  $k > 1$ , o número de nêutrons cresce de geração para geração e a reação em cadeia vai se multiplicando sem limite. O sistema assim caracterizado é dito supercrítico.

## 4 METODOLOGIA UTILIZADA NO CÁLCULO DE FATORES DE DANCOFF EM GEOMETRIA *CLUSTER*

Este capítulo dedica-se à abordagem da metodologia empregada na determinação dos fatores de Dancoff. O código computacional responsável pelos dados gerados é brevemente detalhado. As sub-rotinas auxiliares envolvidas no cálculo são descritas e suas funções são exemplificadas. Os módulos principais, referentes aos métodos de Monte Carlo e Direto, são apresentados em seções distintas. Uma vez caracterizado o ambiente computacional, descrevemos as células combustíveis. Finalizando, apresentam-se as transformações que resultaram na metodologia utilizada na determinação desses fatores.

### 4.1 O código WIMSD

O código WIMS foi desenvolvido pela AEE (*Atomic Energy Establishment*) em linguagem Fortran, originalmente para o computador IBM-7090, tendo sido modificado para se ajustar a problemas especiais ao longo dos anos. Existe um conjunto de versões comerciais ou versões com distribuição restrita. Aquelas disponíveis através do Banco de Dados da NEA (*Nuclear Energy Agency*) pertencem à classe WIMSD. Todavia, a aproximação geral para a solução da equação de transporte é comum a todas as suas versões. Atualmente, ainda é empregado nos cálculos de parâmetros físicos envolvendo arranjos de células heterogêneas de vários tipos de reatores. Trata tanto barras combustíveis quanto porções mais extensas do núcleo do reator.

Compilada com 69 grupos de energia (14 rápidos, 13 de ressonância e 42 térmicos), sua biblioteca básica possui dados multigrupos referentes aos principais moderadores: hidrogênio, deutério, grafite, berílio e oxigênio. Ao usuário são oferecidas opções de cálculos precisos, utilizando-se vários grupos de energia, ou cálculos mais rápidos envolvendo uma quantidade menor de grupos [Askew et al., 1966]. Neste trabalho, utiliza-se uma versão mais recente, WIMS-D4, modificada e compilada através do software Fortran Lahey 77. Com vistas a oferecer uma visão geral do código, apresenta-se na Figura 4.1 um esquema de sua lógica computacional. Destaca-se, em azul, a parte que contém o conjunto de procedimentos concernentes à metodologia proposta. Essa versão possui um total de 134 sub-rotinas, sendo que, aproximadamente, 10% dessas estão envolvidas diretamente nas modificações decorrentes da implementação desse novo método.

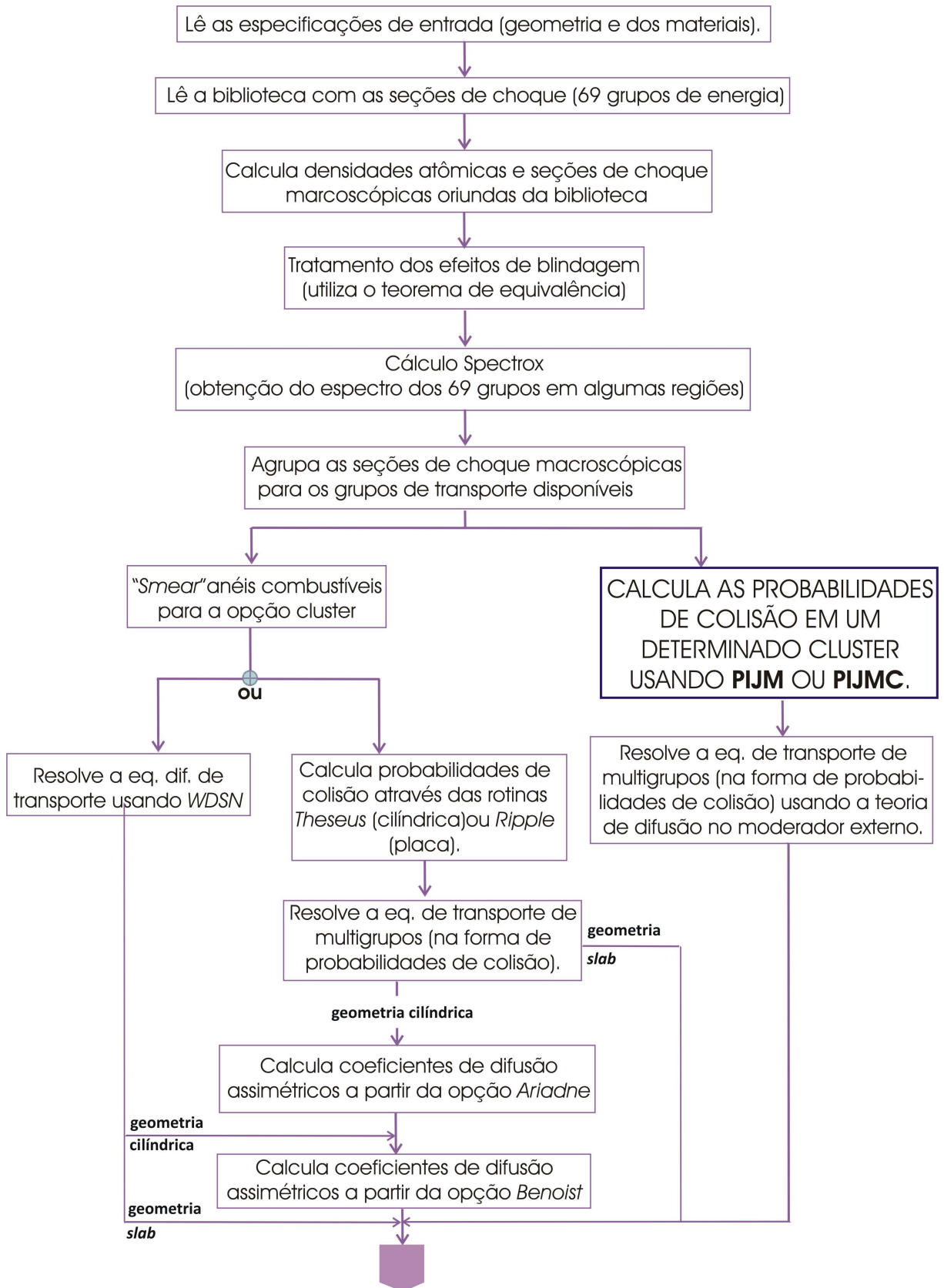


Figura 4.1 – Sequências computacionais do código WIMSD. Tradução livre de [Askew et al., 1966].

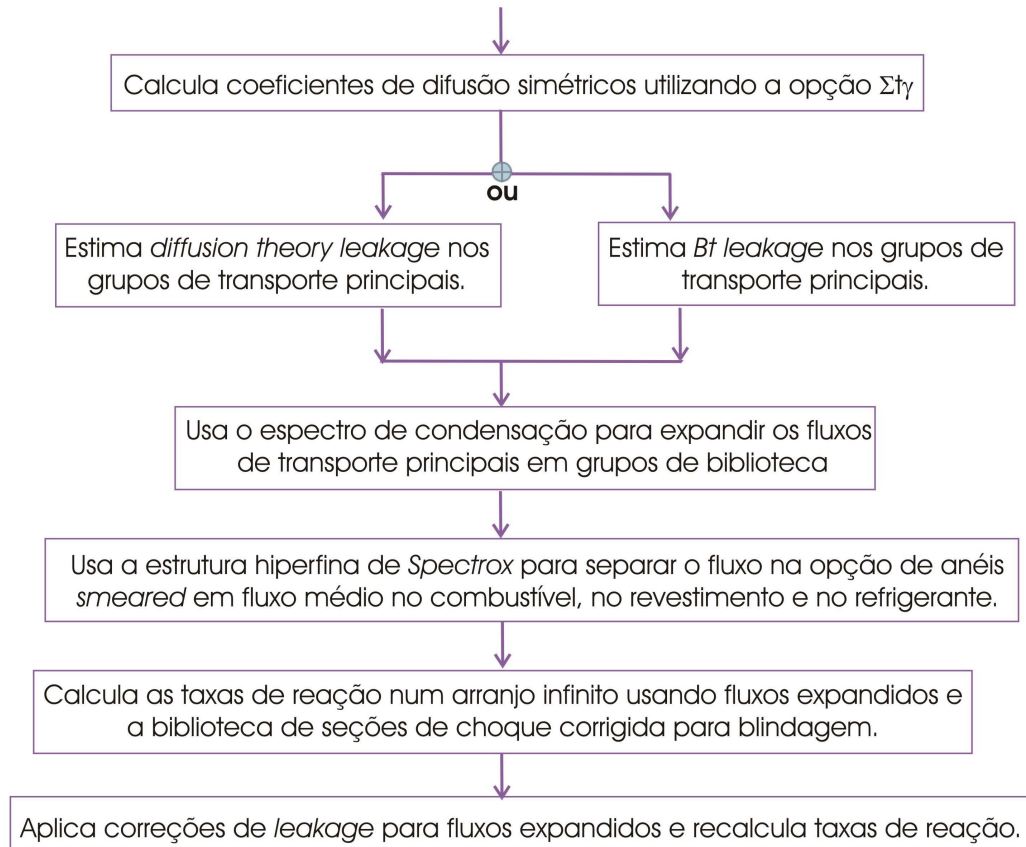


Figura 4.1 – Sequências computacionais do código WIMSD – continuação. Tradução livre de [Askew et al., 1966].

As principais sub-rotinas desse conjunto são PIJM e PIJMC. Ambas são responsáveis pelo cálculo de probabilidades de escape e colisão. A primeira determina essas probabilidades a partir da integração numérica de funções de Bickley de ordem três, enquanto a segunda o faz utilizando o método de Monte Carlo. Dada sua importância no cálculo dos fatores de Dancoff, ambas são detalhadas mais a frente em seções distintas. Outras sub-rotinas, ou módulos, que merecem destaque são listadas abaixo e suas funções explicadas sucintamente.

As células combustíveis em questão são consideradas infinitamente longas na direção axial<sup>14</sup> possuindo contorno externo cilíndrico ou quadrado. Apresentam-se divididas em setores anulares concêntricos, os quais podem ser subdivididos. Cada um desses setores é caracterizado por seu ângulo diretor em relação a um eixo fixo de referência. Um arranjo de varetas, com diâmetros distintos ou não, é superposto a essa configuração. Cada uma delas pode ser dividida radial e azimutalmente em relação aos seus centros. As divisões azimutais

<sup>14</sup> Portanto, onde se lê volume, leia-se volume por unidade de altura.



são caracterizadas por seus ângulos diretores em relação ao eixo que une os centros da célula e da vareta.

O cálculo do volume e a identificação de cada região da célula, bem como das varetas, são efetuados pela sub-rotina REGION. A numeração se dá a partir do centro da célula, no sentido anti-horário, começando pelo setor de menor ângulo diretor. Então, de acordo com exemplo ilustrado na Figura 4.2, a primeira região numerada é a mais central cujo ângulo diretor é igual a zero. O segundo setor anular encontra-se subdividido em outros dois setores com ângulos diretores de  $\pi/4$  e  $5\pi/4$  identificando as regiões 2 e 3 respectivamente. O último setor não está subdividido; é identificado, portanto, como região 4 em ambos os casos.

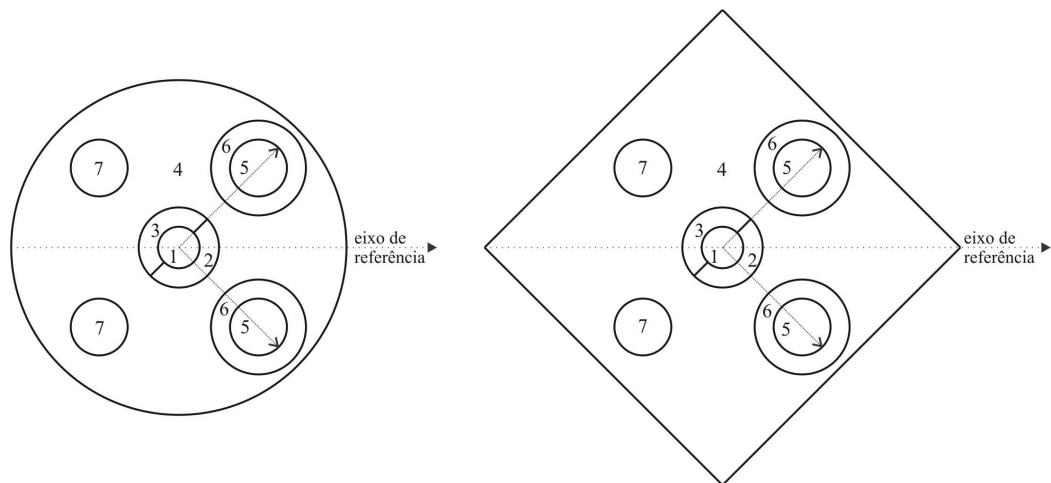


Figura 4.2 – Células com contorno externo cilíndrico e quadrado em geometria *cluster*.

Uma vez terminada a identificação das regiões da célula, passa-se para a identificação das regiões das varetas, as quais são similarmente numeradas. O sentido permanece o mesmo, anti-horário, iniciando pelo setor de menor ângulo diretor em relação ao eixo que une os centros da vareta e da célula. Neste ponto, salienta-se ponto que regiões equivalentes de varetas idênticas recebem a mesma numeração, ou seja, regiões 5, 6 e 7 da Figura 4.2. Regiões vazias não são numeradas.

A construção das malhas de integração é feita, individualmente, para setores anulares e setores de varetas<sup>15</sup>. As linhas que geram as malhas também representam trajetórias descritas pelo nêutron no plano  $xy$ . Cada segmento da trajetória, Figura 4.3, é associado à região que está atravessando e ao material que a compõe. A sub-rotina TRACK faz essa associação e determina, também, as distâncias percorridas. No exemplo abaixo, foram

<sup>15</sup> Detalhada na revisão bibliográfica, ver Figura 2.7.

identificadas onze distâncias geométricas ( $t_1, t_2, \dots, t_{11}$ ). Essas, quando multiplicadas pela seção de choque macroscópica total da região associada, resultam em um conjunto de espessuras ópticas utilizadas no cálculo das funções de Bickley de ordem três.

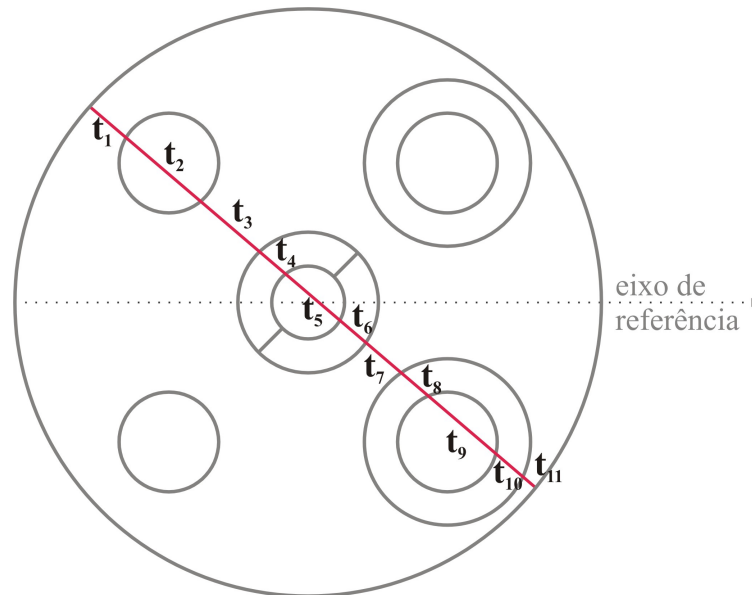


Figura 4.3 – Exemplo da trajetória descrita por um nêutron no plano perpendicular ao eixo axial. Observam-se onze segmentos cada um associado a diferentes regiões pertencentes a setores anulares ou de varetas.

Para a célula combustível com contorno externo quadrado, utiliza-se, também, a sub-rotina SQUARE<sup>16</sup>. As interseções do traço primário e do traço refletido com os lados da célula quadrada, bem como a distância e os ângulos que esses possuem em relação ao centro da célula, são determinados por ela.

No caso do Método Direto, utilizam-se as sub-rotinas QUAD, associada às quadraturas de Gauss, e BI3, responsável pelo cálculo das funções de Bickley de ordem três. O valor dessas funções é obtido a partir de um algoritmo rápido baseado em aproximações racionais de Chebyshev. Por outro lado, para o método de Monte Carlo utiliza-se a função RANF, responsável pela geração de números aleatórios.

Uma última sub-rotina que merece destaque é a R3. Dentre suas funções, está a aplicação de testes de consistência e a formatação dos dados impressos no arquivo de saída

<sup>16</sup> Detalhada na seção 4.1.3.

padrão. Na versão que utiliza o método de Monte Carlo, além das funções descritas acima, também era responsável pelo cálculo dos fatores de Dancoff<sup>17</sup>.

#### 4.1.1 Sub-rotina PIJM

A sub-rotina PIJM tem como função principal o cálculo de probabilidades de transmissão entre regiões, entre superfícies, entre região e superfície e vice-versa. Essas probabilidades são calculadas pela integração direta das funções de Bickley, salvo nas transmissões envolvendo regiões de grande volume e regiões de pequeno volume, onde são utilizadas relações de reciprocidade. Disponibiliza-se, na Figura 4.4, um fluxograma simplificado apresentando a lógica computacional dessa sub-rotina. Não obstante, acredita-se que é importante apresentar um breve resumo da metodologia empregada no cálculo das probabilidades de colisão,  $P_{a \rightarrow b}$ , entre duas regiões quaisquer,  $a$  e  $b$ .

Primeiramente, são lidas as especificações de entrada. Uma vez que tenham sido numeradas as regiões da célula e das varetas, a sub-rotina constrói a malha de integração. Os segmentos da trajetória descrita pelo nêutron são identificados de acordo com a região que atravessam, Figura 4.3, resultando num conjunto de espessuras ópticas. Essas, por sua vez, são utilizadas no cálculo das funções de Bickley e, conseqüentemente, na determinação das probabilidades. Nesse momento, a contribuição de um segmento para o cálculo de  $P_{a \rightarrow b}$  só será considerada se a região  $a$  for um setor anular e se  $V_a \leq V_b$ . Caso contrário, a sub-rotina analisará o segmento subsequente contido na mesma trajetória, e assim sucessivamente, até que essas condições sejam satisfeitas.

---

<sup>17</sup> Assumindo-se absorção total do combustível, em Bogado Leite et al., 2004b.

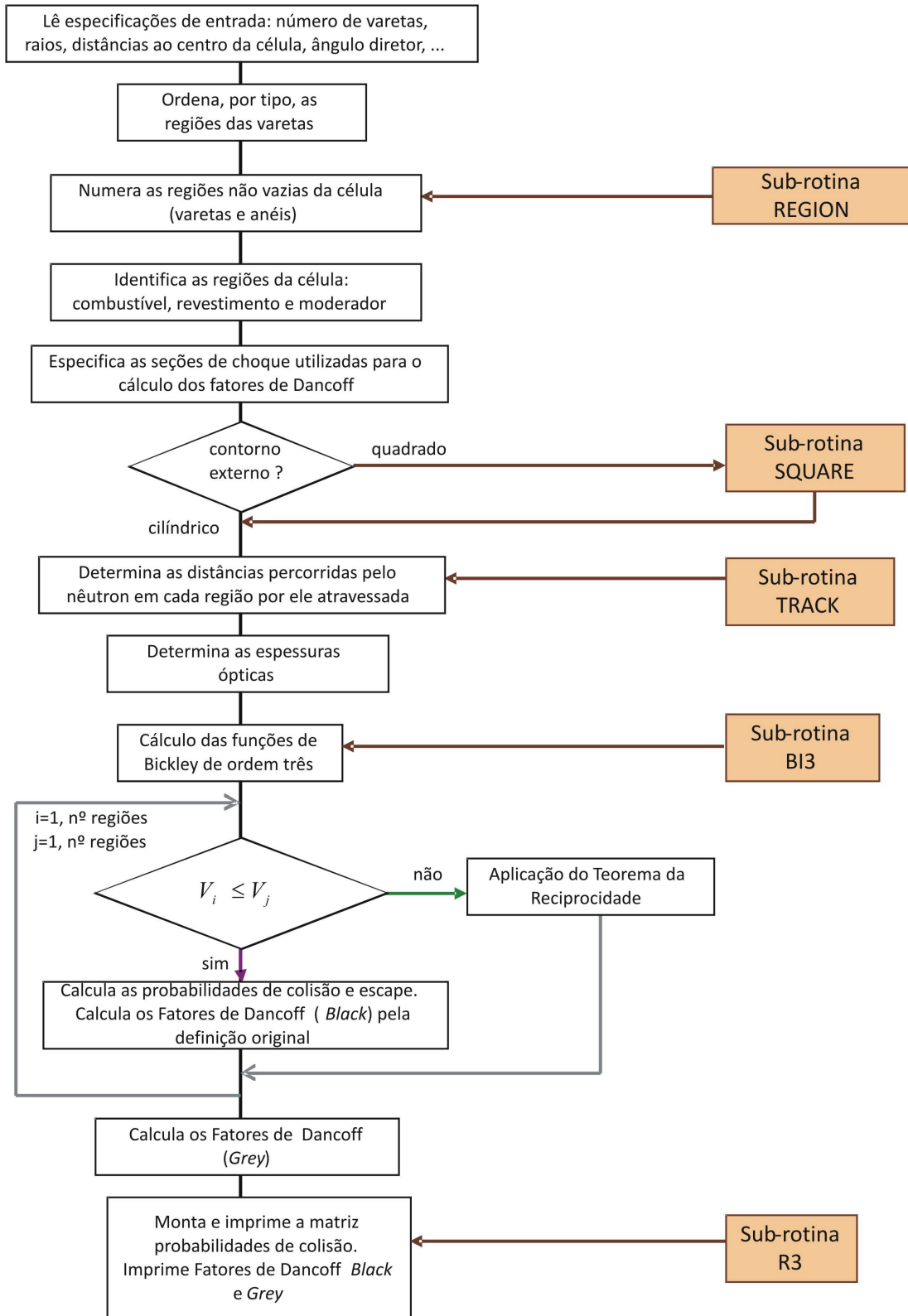


Figura 4.4 – Fluxograma simplificado da sub-rotina PIJM. Em destaque, as sub-rotinas auxiliares.

Assim, a probabilidade de um nêutron emitido uniformemente e isotropicamente na região  $a$  colidir na região  $b$ , de acordo com a Figura 3.1, é calculada através de

$$P_{a \rightarrow b} = \frac{1}{2\pi \Sigma_a V_a} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} [Ki_3(\tau_a + \tau^* + \tau_b) + Ki_3(\tau^*) - Ki_3(\tau_a + \tau^*) - Ki_3(\tau_b + \tau^*)] dx, \quad (3.21)$$

e a probabilidade de um nêutron emitido uniformemente e isotropicamente na região  $a$  colidir na própria região  $a$ , probabilidade de autocolisão, é calculada através de

$$P'_{a \rightarrow a} = 1 - \frac{1}{2\pi \Sigma_a V_a} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-\infty}^{+\infty} [Ki_3(0) - Ki_3(\tau_a)] dx. \quad (3.22)$$

Entretanto, se  $V_a > V_b$ , sendo  $b$  qualquer região do sistema,  $P_{a \rightarrow b}$  será obtida através de relações de reciprocidade<sup>18</sup>, Equação 3.3, *a posteriori*. A convergência obtida a partir dessas relações é melhor que a obtida com o cálculo direto dessas probabilidades e sua aplicação economiza tempo computacional. Uma vez exauridas as contribuições referentes aos setores anulares, passa-se ao tratamento análogo dispensado aos setores das varetas. Ao final, têm-se as matrizes de probabilidade de colisão para cada grupo de energia especificado no arquivo de entrada.

Concomitantemente, são determinados os fatores de Dancoff a partir da definição original, Equação 2.3, assumindo-se absorção total do combustível. Utilizando-se a regra trapezoidal simples para a variável angular e quadraturas de Gauss para a variável linear, essa equação é aproximada por [Bogado Leite et al., 2004a]

$$C = \frac{1}{2\pi^2} h \sum_{i=1}^M f_i \sum_{j=1}^N w_j [Ki_3(\tau_{i,j, \text{left}}) + Ki_3(\tau_{i,j, \text{right}})], \quad (4.1)$$

na qual  $h$  é o elemento angular (constante),  $f_i$  vale 0,5 para  $i$  igual 1 ou  $M$ , caso contrário vale 1,  $w_j$  são os pesos das quadraturas, e  $\tau$  são as espessuras ópticas à esquerda e à direita da vareta combustível em questão. A integral de  $-r$  a  $r$  é substituída por uma integral de 0 a  $r$ .

Finalizando, as opções de simetria disponíveis em PIJM indicam apenas que certas trajetórias de nêutrons são repetidas em posições simétricas. Assim, contribuições para o

---

<sup>18</sup> Maiores detalhes na seção 3.1.

cálculo das probabilidades são efetuadas uma única vez. Com isso, reduz-se o número de regiões envolvidas nas matrizes e o número de ângulos requeridos na integração numérica.

#### 4.1.2 Sub-rotina PIJMC

Essa sub-rotina é mais uma alternativa de cálculo de probabilidades de escape e colisão, desenvolvida para o código WIMSD, empregando o método de Monte Carlo para determiná-las. Esse método utiliza distribuições de probabilidade representativas dos valores possíveis dos parâmetros físicos envolvidos, assim como um gerador de números aleatórios.

Em síntese, a técnica se baseia no acompanhamento de histórias de nêutrons e na contabilização das distâncias ópticas percorridas. Esses nêutrons são gerados em cada uma das regiões da célula que contêm material. As distâncias são contabilizadas até que haja uma colisão ou que o nêutron escape da célula. Na Figura 4.5, disponibiliza-se um fluxograma simplificado apresentando a lógica computacional dessa sub-rotina. A seguir, apresenta-se um breve resumo da metodologia empregada na determinação das probabilidades de colisão,  $P_{a \rightarrow b}$ , entre duas regiões quaisquer,  $a$  e  $b$ .

Inicialmente, selecionam-se a posição inicial  $P$  e a direção ( $\theta$ ,  $\varphi$ ) de emissão do nêutron, Figura 4.6, utilizando-se um gerador de números aleatórios. Sua trajetória, conhecida a partir das coordenadas acima, é projetada no plano horizontal  $xy$ . Então, as distâncias percorridas pelo nêutron, em cada região, são determinadas pela sub-rotina TRACK. A cada trajetória associa-se um conjunto de comprimentos ( $t_a$ ,  $t^*$  e  $t_b$ ) relativos às regiões atravessadas. A seguir, os caminhos ópticos são determinados por

$$T_b = \frac{\sum_b t_b}{\text{sen } \theta} = \frac{\tau_b}{\text{sen } \theta}, \quad (4.2)$$

na qual  $\Sigma_b$  é a seção de choque macroscópica total da região  $b$  e  $\theta$  é o ângulo polar.

O próximo passo é a determinação da região onde o nêutron sofre sua primeira colisão. Para tanto, compara-se o caminho óptico percorrido desde a origem com uma distância selecionada aleatoriamente. Essa seleção é feita a partir da probabilidade de escape de um sistema de  $b$  regiões, ou seja,

$$n = P_{esc} = \exp\left(-\sum_{k=1}^b T_k\right). \quad (4.3)$$

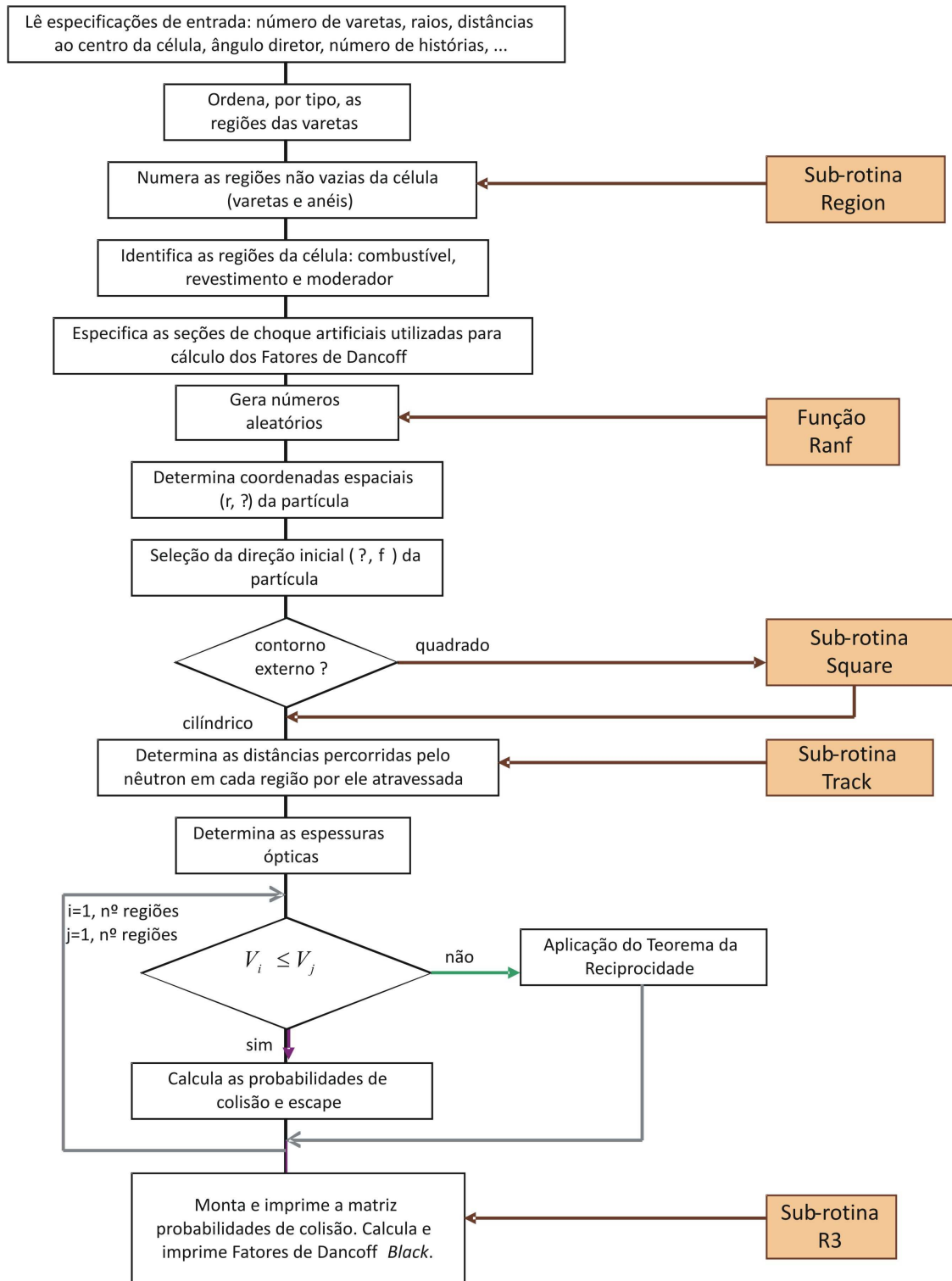


Figura 4.5 – Fluxograma simplificado da sub-rotina PIJMC. Em destaque as sub-rotinas auxiliares.

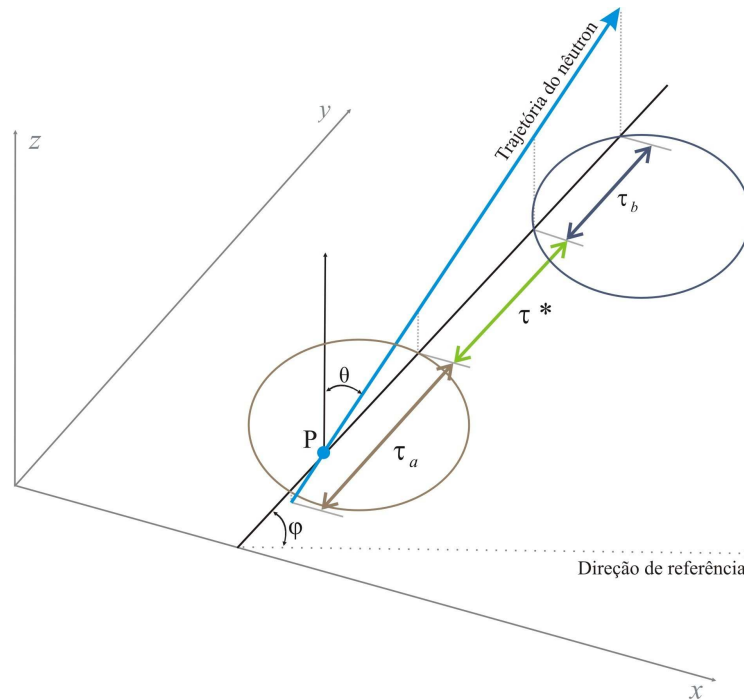


Figura 4.6 – Seleção da trajetória do nêutron. A direção de referência pertence ao plano horizontal  $xy$ . Adaptado de [Bogado Leite, 2003].

Portanto, a região onde ocorre a primeira colisão é a primeira que satisfaz a relação

$$\ln n \geq \left( - \sum_{k=1}^b T_k \right), \quad (4.4)$$

onde  $n$  é um número aleatório contido no intervalo  $(0,1)$ . Nesse caso, a história termina e o nêutron é computado nessa região. Caso contrário, o nêutron é contabilizado como tendo escapado, sem colidir.

Em princípio, utilizando-se um grande número de histórias é possível calcular as probabilidades de colisão,  $P_{a \rightarrow b}$ , em qualquer sistema, independente da geometria. Porém, se as regiões envolvidas possuem espessuras ópticas relativamente pequenas, a simulação direta não é indicada. Dependendo da precisão desejada, o número de histórias poderá ser tão grande que inviabilizará o processo.

A solução é utilizar uma técnica de redução de variância, na qual a frequência de ocorrência do evento de interesse é artificialmente aumentada. Assim, por exemplo, numa região  $b$  qualquer da célula, a estatística de contagem pode ser otimizada se “forçarmos” o



nêutron a escapar de todas as regiões anteriores a  $b$  e o “obrigarmos” a ter sua primeira colisão em  $b$ . Isso é feito distorcendo-se a respectiva distribuição cumulativa de probabilidade de modo que esta se torne 1.0 (igual à unidade) na fronteira da região de interesse, e compensando a distorção com ajustes nos pesos atribuídos ao nêutron [Bogado Leite, 2003].

Portanto, uma partícula de peso

$$W = W_0 \exp\left(-\sum_{k=1}^{b-1} T_k\right) \quad (4.5)$$

chega à região  $b$  sem colidir, enquanto outra de peso

$$W = W_0 \exp\left(-\sum_{k=1}^{b-1} T_k\right) [1 - \exp(-T_b)], \quad (4.6)$$

escapa das  $b-1$  regiões anteriores colidindo, obrigatoriamente, na região  $b$ . Nas equações acima,  $W_0$  é o peso original da partícula e seu valor é igual a um. Ao final, as probabilidades de colisão são determinadas adicionando-se os pesos  $W$  da Equação 4.6 e dividindo-se a soma pelo número total de histórias.

#### 4.1.3 Sub-rotina SQUARE

A principal dificuldade associada à implementação de uma sub-rotina responsável pelo tratamento de uma célula combustível com contorno externo quadrado é a necessidade de avaliar explicitamente as reflexões das trajetórias do nêutron e suas contribuições para as probabilidades de transmissão [Bogado Leite, 2001]. A metodologia utilizada na solução dessa dificuldade é apresentada a seguir.

Primeiramente, considera-se que a origem de um sistema de referência cartesiano encontra-se no centro da célula, Figura 4.7, e toma-se o eixo  $x$  como o eixo de referência. A equação da reta denominada  $L1$  (lado 1 do quadrado da Figura 4.7) é dada por

$$y = x + R, \quad (4.7)$$

na qual  $R$  é o raio do círculo circunscrito ao quadrado. De acordo com o referencial adotado, essa reta passa pelos pontos de coordenadas  $(-R,0)$  e  $(0,R)$ . O ponto em que a reta  $LT$  cruza o eixo  $x$  é dado por

$$\cos \theta = \frac{r}{a}, \quad (4.8)$$

enquanto que o ponto em que cruza o eixo  $y$  é dado por

$$\text{sen} \theta = \frac{r}{b}. \quad (4.9)$$

Conhecendo-se esse dois pontos, é possível determinar a equação da reta  $LT$ , que representa a trajetória de um nêutron que cruza o lado  $L1$  do quadrado, ou seja,

$$y \text{sen} \theta + x \cos \theta = r. \quad (4.10)$$

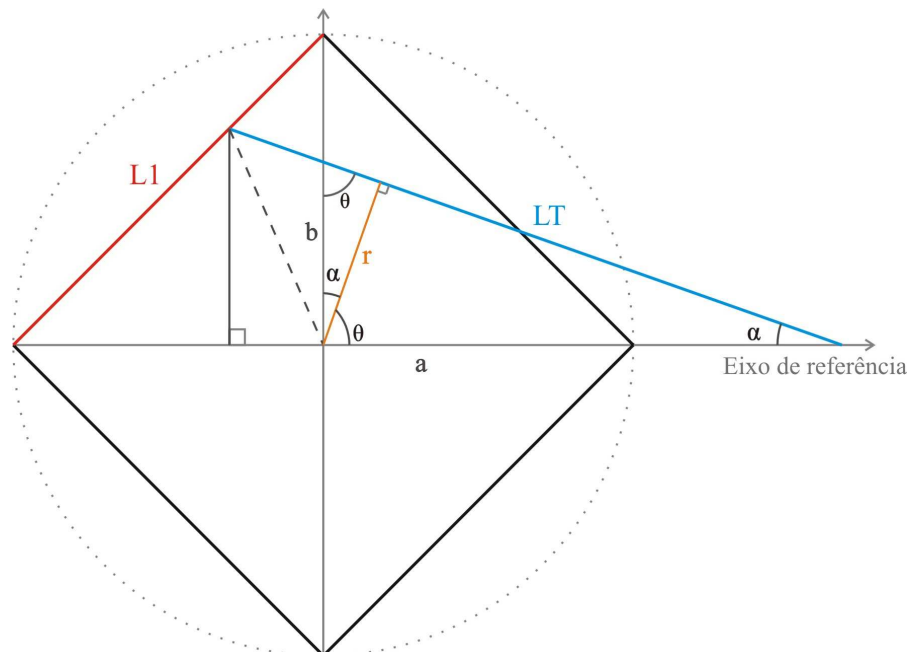


Figura 4.7 – Ilustração utilizada para demonstrar a determinação do ponto onde a trajetória do nêutron, reta  $LT$ , intercepta o limite da célula quadrada, reta  $L1$ .

Finalmente, as coordenadas do ponto de interseção da trajetória (reta  $LT$ ) com o lado  $L1$  do quadrado satisfazem as Equações 4.7 e 4.10 simultaneamente, e, portanto, são

$$x = \frac{r - R \operatorname{sen} \theta}{\cos \theta + \operatorname{sen} \theta} \quad (4.11)$$

e a própria Equação 4.7.

Um procedimento análogo ao apresentado é utilizado para as demais arestas. Desse modo, conhecendo-se as coordenadas  $r_i$  e  $\theta_j$ , com respeito à origem do sistema de coordenadas, é possível determinar as coordenadas onde ocorre a interseção entre a trajetória do nêutron, reta  $LT$ , com os lados do quadrado ( $L1$ ,  $L2$ ,  $L3$  e  $L4$ ), ou seja,

$$x = \frac{r_i - R \operatorname{sen} \theta_j}{\cos \theta_j + \operatorname{sen} \theta_j} \quad \text{e} \quad y = x + R, \text{ (lado } L1), \quad (4.12)$$

$$x = \frac{r_i - R \operatorname{sen} \theta_j}{\cos \theta_j - \operatorname{sen} \theta_j} \quad \text{e} \quad y = -x + R, \text{ (lado } L2), \quad (4.13)$$

$$x = \frac{r_i + R \operatorname{sen} \theta_j}{\cos \theta_j + \operatorname{sen} \theta_j} \quad \text{e} \quad y = x - R, \text{ (lado } L3), \quad (4.14)$$

$$x = \frac{r_i + R \operatorname{sen} \theta_j}{\cos \theta_j - \operatorname{sen} \theta_j} \quad \text{e} \quad y = -x - R, \text{ (lado } L4), \quad (4.15)$$

nas quais  $R$  é o raio do círculo circunscrito. As interseções que ocorrem dentro do círculo circunscrito são repassadas à sub-rotina TRACK.

## 4.2 Caracterização das Células Combustíveis

Neste trabalho, utilizam-se quatro células combustíveis: duas células canadenses (CANDU-37 e CANFLEX), uma célula hipotética de 6 regiões com contorno externo quadrado e sua equivalente cilíndrica. As células canadenses diferem quanto ao número e ao

diâmetro das varetas, enquanto que a célula hipotética e sua equivalente cilíndrica diferem quanto às condições de contorno impostas.

#### 4.2.1 Células Canadenses CANDU-37 e CANFLEX

As células combustíveis CANFLEX, Figura 4.8, e CANDU-37, Figura 4.9, são projetos da AECL (*Atomic Energy of Canada Limited*) com 43 e 37 varetas combustíveis de  $UO_2$  (dióxido de urânio), respectivamente. Cada uma possui 50 cm de comprimento por pouco mais de uma dezena de centímetros de diâmetro.



Figura 4.8 – Célula CANFLEX [AECL, 2009].

As varetas combustíveis dessas células encontram-se dispostas em arranjos compactos no interior de tubos de pressão, concêntricos a um tubo externo, e separados por uma região de gás. O refrigerante, no tubo de pressão, e o moderador, na parte externa da célula, são de  $D_2O$  (água pesada). O revestimento das varetas é de Zircaloy-4, uma liga de Zircônio universalmente utilizada para revestimento de combustíveis em reatores do tipo PWR (*Pressurized Water Reactor*) e HWR (*Heavy Water Reactor*).



Figura 4.9 – Célula CANDU-37 [Bruce, 2009].

A célula CANFLEX possui varetas com diâmetros diferentes, Figura 4.10, sendo as internas maiores que as externas. Esse tipo de célula é um aperfeiçoamento de CANDU-37 cujas varetas são todas de mesmo diâmetro, Figura 4.11. O arranjo contendo dois diâmetros de varetas proporciona um aumento na performance do combustível [AECL, 2009].

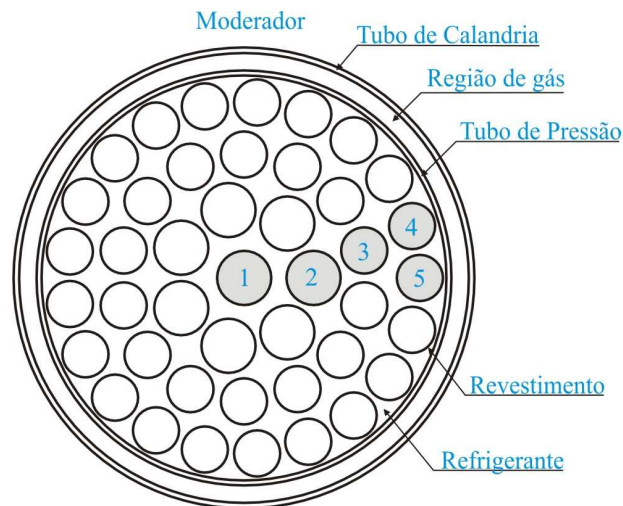


Figura 4.10 – Seção transversal da célula combustível canadense CANFLEX.

No núcleo do reator, em ambos os casos (CANDU-37 e CANFLEX) as células combustíveis são dispostas distantes uma da outra. Assim, o efeito produzido por células vizinhas pode ser negligenciado durante a determinação dos fatores de Dancoff [Kim e Cho, 1999]. As principais características dessas células encontram-se na Tabela 4.1.

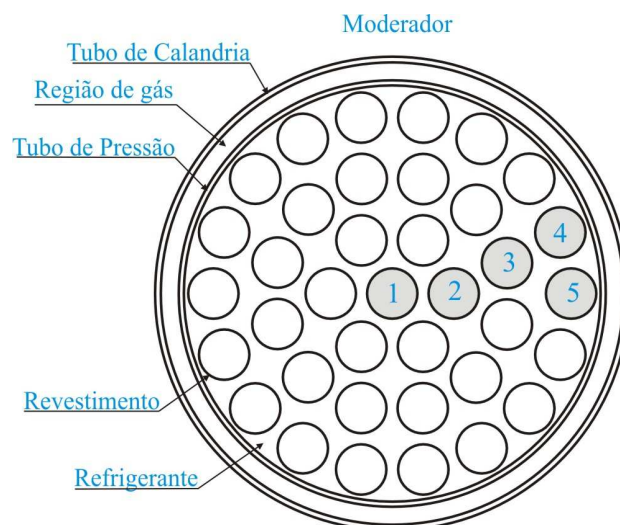


Figura 4.11 – Seção transversal da célula combustível canadense CANDU-37.

Tabela 4.1 – Principais características das células combustíveis CANDU-37 e CANFLEX [Bogado Leite, 2004b].

<b>Características</b>	<b>CANDU-37</b>	<b>CANFLEX</b>
Número de varetas (UO <sub>2</sub> )	37	43
Diâmetro pastilha (cm)	1,220	Int.: 1,274 Ext.: 1,080
Dens. Pastilha (g/cm <sup>3</sup> )	10,6	10,6
Espessura revest. (cm)	0,045	Int.: 0,038 Ext.: 0,035
Material revestimento	Zry-4	Zry-4
Varetas do 1º anel:		
Número	6	7
Dist. ao centro da célula (cm)	1,48845	1,73400
Ângulo em relação ao eixo de referência (rad)	0	0
Varetas do 2º anel:		
Número	12	14
Dist. ao centro da célula (cm)	2,8753	3,0750
Ângulo em relação ao eixo de referência (rad)	$\pi/12$	$\pi/14$
Varetas do 3º anel:		
Número	18	21
Distância ao centro da célula (cm)	4,3307	4,3840
Ângulo em relação ao eixo de referência (rad)	0	0
Tubo de pressão (cm):		
Raio interno	5,1689	5,1689
Raio externo	5,6032	5,6032
Tubo externo (cm):		
Raio interno	6,4478	6,4478
Raio externo	6,5875	6,5875

#### 4.2.2 Célula Hipotética de Seis Regiões

A célula hipotética utilizada é constituída por seis regiões, sendo duas delas regiões de combustíveis distintos (destacadas em cinza), duas de refrigerante (delimitadas pelo contorno tracejado e pela borda externa) e duas de revestimento, conforme Figura 4.12 e Figura 4.13. Cinco varetas compõem a célula, sendo uma central e as demais distando 1,35 cm do centro, formando ângulos de  $0$ ,  $\pi/2$ ,  $\pi$  e  $3\pi/2$  com a horizontal. A região de refrigerante mais interna,

delimitada pela linha tracejada, possui 0,76 cm de raio. Outras propriedades encontram-se detalhadas abaixo na Tabela 4.2.

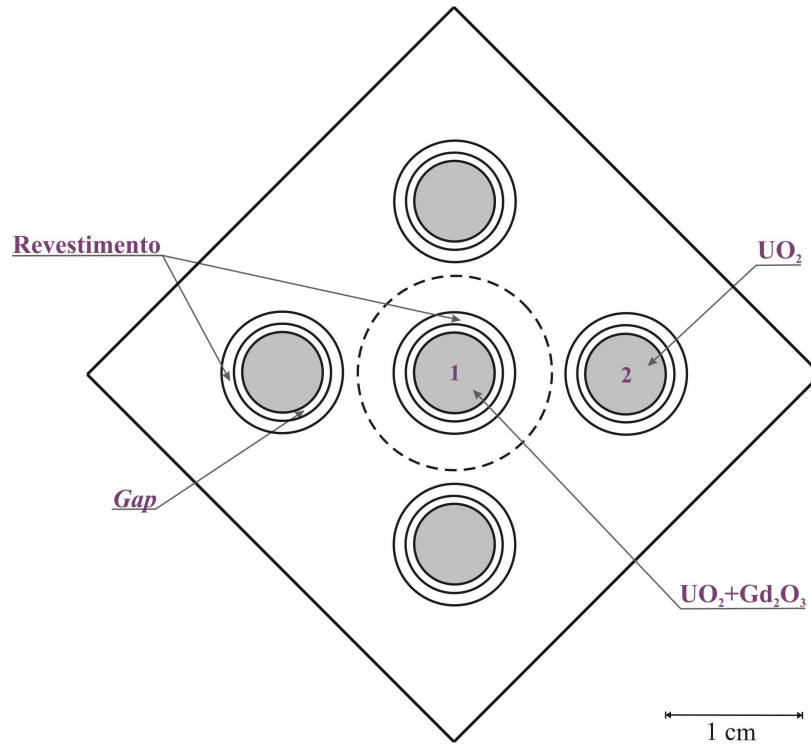


Figura 4.12 – Seção transversal da célula combustível hipotética com contorno externo quadrado.

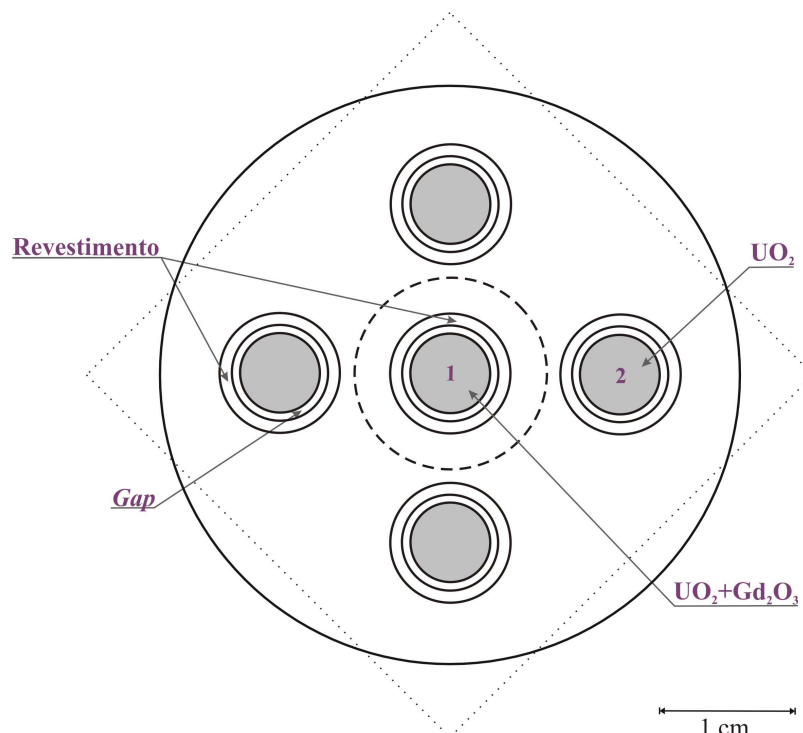


Figura 4.13 – Seção transversal da célula cilíndrica equivalente.

Ambas as células estão orientadas de forma que as arestas dos quadrados, linha cheia ou pontilhada, encontram-se sobre os eixos de coordenadas  $xy$ . Escolhe-se o eixo  $x$  para a direção de referência, conforme Figura 4.2. O raio da célula cilíndrica equivalente é calculado visando à preservação da igualdade entre as áreas das seções transversais. Por último, observa-se que a diferença entre as células reside apenas no contorno externo, ou seja, utiliza-se o mesmo arranjo e a mesma disposição de varetas.

Tabela 4.2 – Propriedades da célula combustível hipotética [Bogado Leite, 2003].

<b>Características</b>		
Geometria		Quadrada
Temperatura (°K)		293
Raio Combustível (cm)		0,40
Espessura <i>Gap</i> (cm)		0,01
Espessura Revestimento (cm)		0,07
Raio círculo inscrito (cm)		2
Composição		(atoms/(b.cm))
a) Elemento Central	Gd <sub>2</sub> O <sub>3</sub> +UO <sub>2</sub>	
U-235	7,70523(-4)	
U-238	2,11010(-2)	
O-16	4,52489(-2)	
Gd-155	1,47878(-4)	
Gd-157	1,56371(-4)	
b) Varetas	UO <sub>2</sub>	
Combustíveis		
U-235	7,29527(-4)	
U-238	2,18600(-2)	
O-16	4,51791(-2)	
c) Revestimento	Zr	
Zr-91	4,32411(-2)	
d) Refrigerante	H <sub>2</sub> O	
H-1	6,67633(-2)	
O-16	3,33817(-2)	



### 4.3 Determinação dos Fatores de Dancoff

Em Jenisch Rodrigues, 2007, fatores de Dancoff foram calculados a partir da Equação 3.39, em função das probabilidades de colisão, assumindo-se absorção parcial do combustível. Para tanto, foi utilizada apenas a célula combustível CANDU-37. Os procedimentos computacionais utilizados na determinação desses fatores foram inseridos diretamente na sub-rotina PIJM, Figura 4.4. Entretanto, essa sub-rotina já havia sido modificada<sup>19</sup> para determinar fatores de Dancoff assumindo absorção total do combustível através da Equação 4.1, ou seja, a partir de sua definição original.

As modificações implementadas, embora oriundas de metodologias diferentes, não permitiam o cálculo simultâneo desses fatores. Logo, a modificação de parâmetros referentes ao cálculo assumindo absorção parcial interferiam diretamente no cálculo assumindo absorção total. Isto é, a seção de choque macroscópica total atribuída ao combustível quando se quer simular uma absorção total é dez vezes maior que a seção atribuída para simular uma absorção parcial.

Portanto, havia a necessidade de se criar “conjuntos independentes” de seções de choque macroscópicas totais, de modo que as modificações efetuadas não interferissem nos cálculos. Cabe lembrar que neste trabalho os fatores de Dancoff são analisados em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador. Ou seja, ao invés de se utilizar os valores de seção de choque disponíveis na biblioteca do WIMSD, atribui-se um intervalo de valores.

Além disso, pretendia-se fazer com que as modificações utilizadas para os testes não interferissem nos demais cálculos do programa. Isto é, os procedimentos computacionais implementados para simulação e teste, assim como as modificações nas seções de choque, não deveriam interferir nos valores reais e nem nos procedimentos já existentes.

#### 4.3.1 Sub-rotina SIGMA

O problema das seções de choque macroscópicas totais é resolvido com a criação de uma sub-rotina chamada SIGMA, Figura 4.14, a qual identifica as regiões da célula e gerencia vetores e variáveis que armazenam as seções de choque atribuídas pelo usuário. Dessa forma, cada região recebe valores de seções de choque macroscópicas que são utilizados apenas nos

---

<sup>19</sup> Conforme visto na Revisão Bibliográfica, Capítulo 2.

cálculos dos fatores de Dancoff, visando à comparação entre as hipóteses de absorção total e parcial do combustível.

Conseqüentemente, garante-se que os demais parâmetros calculados por PIJM sejam feitos, paralelamente, a partir das seções de choque oriundas da biblioteca de dados do código WIMSD e facilita-se, também, a eventual substituição de valores para testes posteriores. A seguir, os procedimentos referentes a essa sub-rotina são apresentados resumidamente.

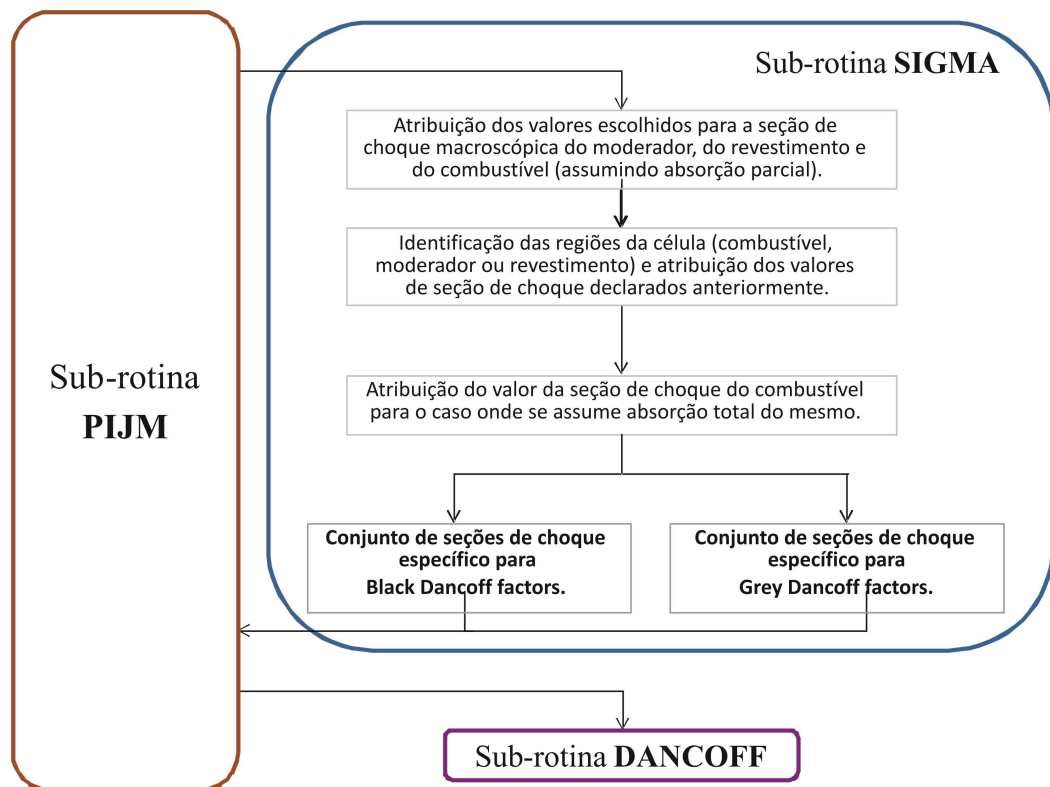


Figura 4.14 – Sequência computacional simplificada da sub-rotina SIGMA.

Primeiramente, um vetor chamado *sigm* recebe os valores de seção de choque macroscópica escolhidos para o moderador, que serão usados durante a simulação. Após, são determinados os valores que serão assumidos pelas seções de choque do combustível e do revestimento, para o caso de absorção parcial. As seções de choque de cada região, provenientes da biblioteca de dados do código, são armazenadas em um vetor chamado *sigorig*.

A seguir, identificam-se as regiões da célula (combustível, revestimento ou moderador) forçando-as a receber os valores de seções de choque declarados anteriormente para a execução dos testes. Por último, “corrige-se” o valor da seção de choque macroscópica

do combustível utilizado no cálculo em que se usa a hipótese de absorção total. Essas modificações levam à determinação de conjuntos de espessuras ópticas específicos para cada caso.

Esses conjuntos retornam à sub-rotina PIJM, onde são utilizados em três cálculos: das probabilidades de colisão, Equações 3.21 e 3.22; dos fatores de Dancoff através da Equação 3.39 (em uma sub-rotina específica); e dos fatores de Dancoff a partir da definição original, Equação 4.1.

#### 4.3.2 Sub-rotina DANCOFF

Uma vez resolvido o problema da determinação de conjuntos independentes de seções de choque para os testes relativos à absorvidade do combustível, busca-se a determinação paralela dos fatores de Dancoff, ou seja, pela definição original e pela definição alternativa. Conforme explicado anteriormente<sup>20</sup>, para sistemas com absorção parcial, a interpretação original não mais se aplica. Porém, nos casos em que se assume absorção total, esses fatores podem ser calculados por ambas as definições.

O cálculo simultâneo dos mesmos é garantido através da inserção de uma nova sub-rotina, intitulada DANCOFF. Basicamente, esse novo algoritmo recebe as matrizes de probabilidade de colisão, oriundas do módulo PIJM, e determina os fatores de Dancoff através da Equação 3.9, assumindo ambas as condições de absorvidade do combustível. Isso pode ser feito graças aos conjuntos de seções de choque independentes criados através da sub-rotina SIGMA.

Concomitantemente, os cálculos referentes à definição original continuam sendo feitos na própria sub-rotina PIJM. Isso porque essa sub-rotina já está adaptada para receber os valores computados para as funções de Bickley de ordem 3. Logo, têm-se como resultado a determinação de fatores de Dancoff *Black* (absorção total do combustível), pelas definições original (Equação 3.35a) e alternativa (Equação 3.39), e a determinação de fatores de Dancoff *Grey* (absorção parcial do combustível) pela definição alternativa.

Anteriormente, quando a sub-rotina PIJM calculava esses fatores apenas pela definição original, eles eram formatados e impressos através da sub-rotina R3. A impressão se dava no mesmo arquivo de saída gerado pelo programa principal. Entretanto, relembra-se que

---

<sup>20</sup> Maiores detalhes na seção 3.3.2.

a independência entre o programa principal e os procedimentos para os testes configura um dos objetivos da presente tese.

Então, busca-se também, com a sub-rotina DANCOFF, separar os valores determinados nas simulações daqueles obtidos a partir das características reais da célula. Esse módulo também fica responsável pela formatação e impressão dos fatores de Dancoff num arquivo de saída próprio, intitulado *dancoff.out*. A inserção dessas duas sub-rotinas proporciona a independência entre o programa principal e os procedimentos computacionais envolvidos nos testes com o Método Direto de cálculo dos fatores de Dancoff. A sequência computacional da sub-rotina PIJM, após a inserção das sub-rotinas SIGMA e DANCOFF, é apresentada na Figura 4.15.

Por outro lado, na sub-rotina PIJMC, que utiliza o Método de Monte Carlo, os fatores de Dancoff são computados somente através da definição em termos de probabilidades de colisão. Os fatores de Dancoff *Black* já eram determinados pelo método probabilístico através da sub-rotina R3 que era responsável, também, pela impressão e testes de consistência. Porém, esse procedimento apresentava as mesmas limitações expostas anteriormente. Assim, com vistas a eliminá-las, as sub-rotinas SIGMA e DANCOFF também foram inseridas no algoritmo responsável pelo cálculo probabilístico. Dessa forma, a versão correspondente do código WIMSD ganha duas novas sub-rotinas. A sequência computacional da sub-rotina PIJMC, após a inserção das novas sub-rotinas, é apresentada na Figura 4.16.

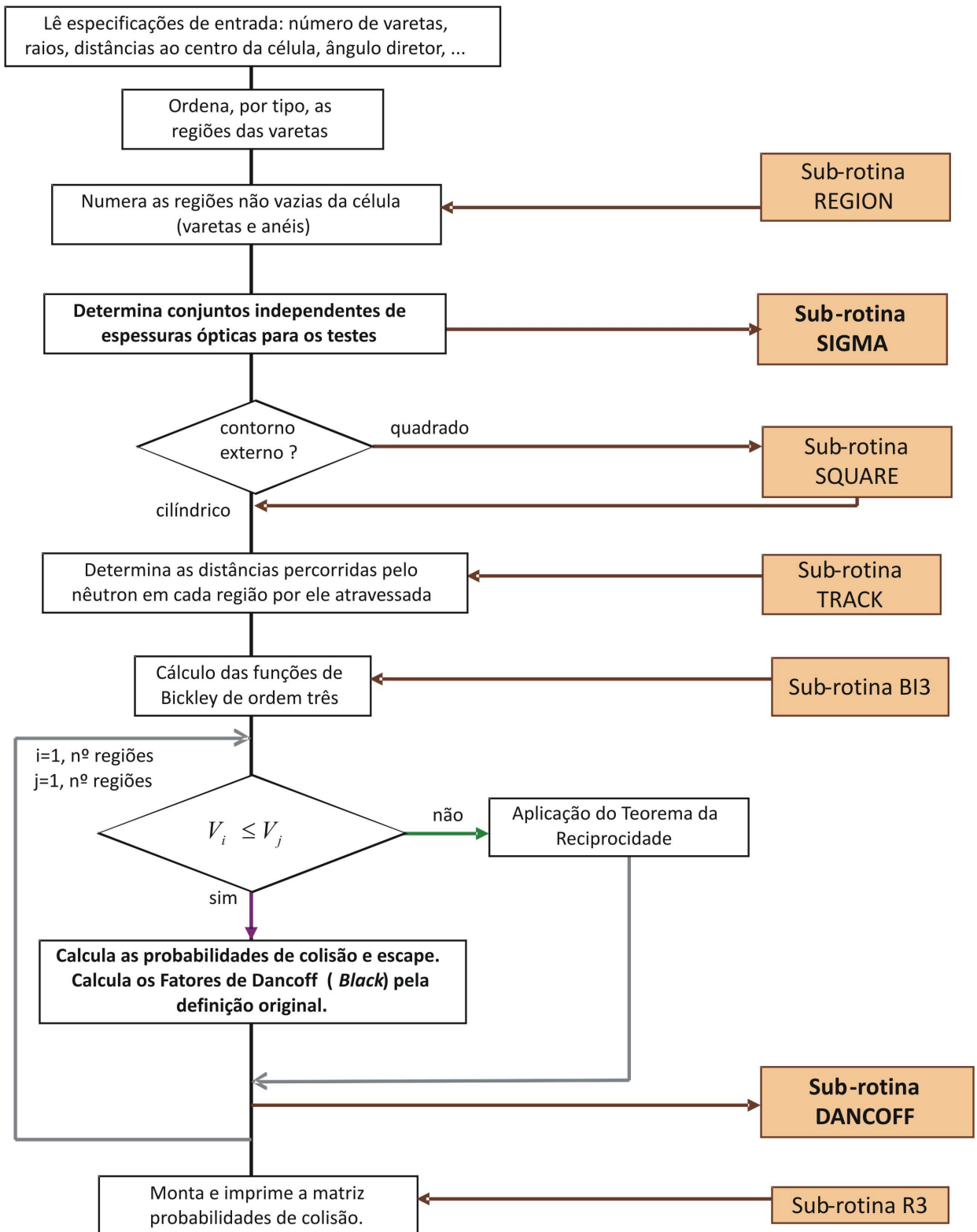


Figura 4.15 – Sequência computacional da sub-rotina PIJM após modificações.

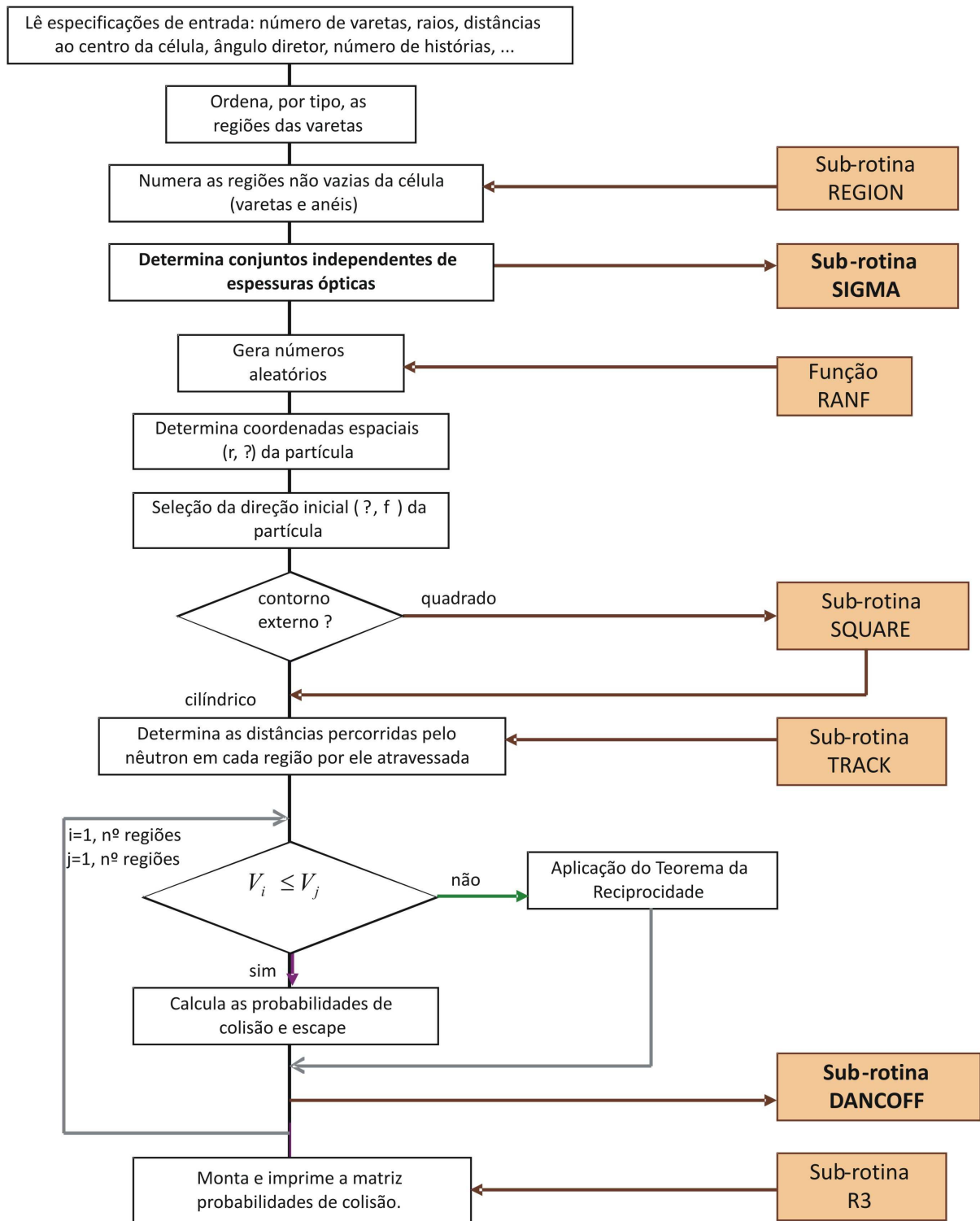


Figura 4.16 – Sequência computacional da sub-rotina PIJMC após modificações.

#### 4.3.4 A Reflexão das Trajetórias dos Nêutrons

A próxima etapa consiste em estender o cálculo dos fatores de Dancoff para células combustíveis com contorno externo quadrado. Para tanto, é necessário considerar explicitamente as reflexões dos traços, Figura 4.17. Isso é realizado considerando as reflexões do traço primário nas duas direções  $(r_i, \theta_j)$  e  $(r_i, \theta_j + \pi)$ . Além disso, as regiões atravessadas por traços primários são consideradas fontes e sumidouros, enquanto que as regiões atravessadas por traços secundários são consideradas apenas sumidouros.

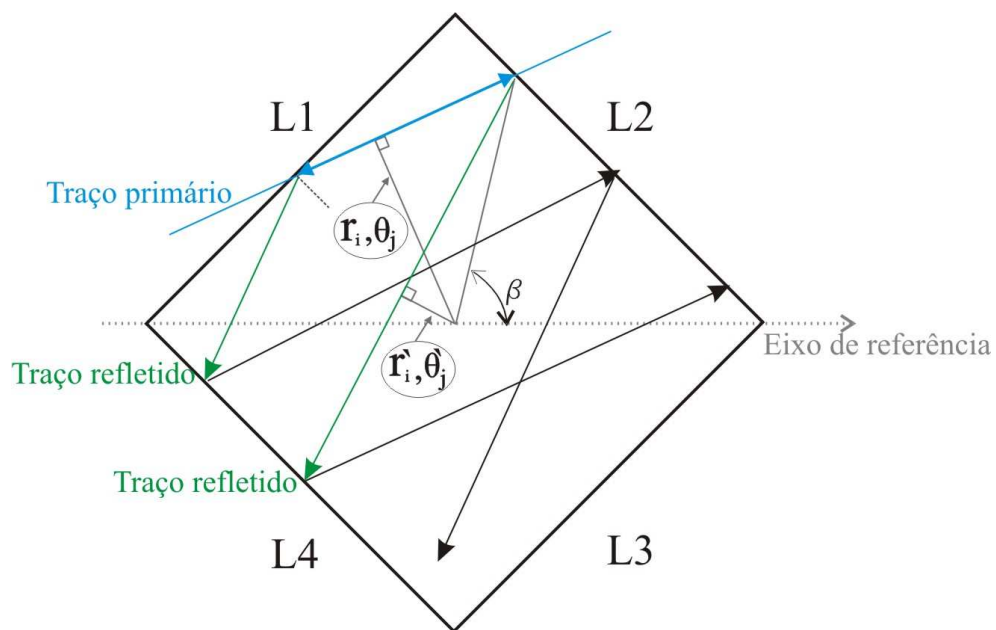


Figura 4.17 – Coordenadas dos traços primário e secundário que representam a trajetória percorrida por um nêutron. Adaptado de [Bogado Leite, 2001].

De acordo com a Figura 4.17, a trajetória de um nêutron, descrita por um traço de coordenadas  $(r_i, \theta_j)$ , terá uma trajetória refletida (traço secundário) cuja coordenada angular será dada por

$$\theta'_j = \frac{3\pi}{2} - \theta_j, \quad (4.16)$$

para os traços refletidos a partir dos lados  $L1$  ou  $L3$ , e

$$\theta'_j = \frac{\pi}{2} - \theta_j, \quad (4.17)$$

para os traços refletidos a partir dos lados  $L2$  ou  $L4$ . Caso as Equações 4.16 e 4.17 resultem em valores negativos,  $\theta'_j$  é redefinido como

$$\theta'_j + 2\pi, \quad (4.18)$$

com vistas a garantir que  $\theta'_j$  se mantenha no intervalo compreendido entre 0 e  $2\pi$ .

O lado a partir do qual o traço é refletido depende das coordenadas  $(r_i, \theta_j)$ . As combinações possíveis encontram-se dispostas na Tabela 4.3. Uma vez que se determina  $\theta'_j$ , pode-se obter  $r'_i$  a partir de

$$r'_i = \frac{r_i \cos(\theta'_j - \beta)}{\cos(\theta_j - \beta)}, \quad (4.19)$$

na qual

$$\beta = \text{tg}^{-1}\left(\frac{y}{x}\right). \quad (4.20)$$

Um número fixo de traços refletidos é calculado para cada traço primário em ambas as direções. Esse valor *default*, na versão WIMSD-4, é igual a dois. Entretanto, o código permite até quatro reflexões, mas sempre em número par.

Nesse momento, a forma como as condições de contorno são aplicadas no problema merece destaque. Descreve-se a seguir, brevemente, sua aplicação tanto no caso em que se assume reflexão difusa quanto no caso em que se assume reflexão especular. Em células com superfície externa cilíndrica, sujeitas a condições de contorno de superfície livre ou de reflexão difusa, *white*, probabilidades de escape e colisão são obtidas através do código WIMSD em duas etapas.

Na primeira, probabilidades não modificadas são calculadas sem considerar o ambiente em que se encontra a célula, assumindo fontes uniformes e isotrópicas no interior de cada região. Além disso, os nêutrons que adentram a célula podem ser representados por



fontes superficiais uniformes, as quais emitem segundo uma distribuição cossenoidal em relação à normal a uma superfície externa. Num segundo momento, a condição de contorno apropriada é aplicada às probabilidades não modificadas, na forma de probabilidades de transferência, representativas do fluxo de nêutrons para dentro e para fora da célula. Isso justifica o fato de, em PIJMC, as probabilidades não modificadas da primeira etapa serem calculadas considerando traços que se estendem até a superfície da célula, por hipótese, isolada.

Tabela 4.3– Tabela com as possibilidades de trajetórias com reflexão especular [Bogado Leite, 2001].

$r_i$		$\theta_j$	Lado da Reflexão				Comentários
+	-	intervalo	L1	L2	L3	L4	
*	*	$(0, \pi/4)$			*	*	Em L4 se $-r_i > R\cos(\pi/2 - \theta_j)$
*	*	$(\pi/4, \pi/2)$		*	*		Em L2 se $r_i > R\cos\theta_j$
*	*	$(\pi/2, 3\pi/4)$		*	*		Em L3 se $-r_i > R\cos(\pi - \theta_j)$
*	*	$(3\pi/4, \pi)$	*	*			Em L1 se $r_i > R\cos(\theta_j - \pi)$
*	*	$(\pi, 5\pi/4)$	*	*			Em L2 se $-r_i > R\cos(3\pi/2 - \theta_j)$
*	*	$(5\pi/4, 3\pi/2)$	*			*	Em L4 se $r_i > R\cos(\theta_j - \pi)$
*	*	$(3\pi/2, 7\pi/4)$	*			*	Em L1 se $-r_i > R\cos(2\pi - \theta_j)$
*	*	$(7\pi/4, 2\pi)$			*	*	Em L4 se $r_i > R\cos(\theta_j - 3\pi/2)$

Por outro lado, para células com contorno externo quadrado, a reflexão especular deve ser explicitamente considerada. Isso porque, as probabilidades de escape e colisão já levam em consideração o ambiente em que a célula se encontra. Nesse caso, os traços se estendem por um número determinado de células vizinhas (*default* =2 na versão WIMSD-4). Logo, para

cada traço primário geram-se dois traços secundários refletidos, os quais devem ser considerados pela sub-rotina PIJMC. Conseqüentemente, o tempo computacional é evidentemente maior do que aquele gasto com sua equivalente cilíndrica.

#### 4.4 A Determinação do $k_{eff}$

Para se entender como o código WIMSD determina o fator de multiplicação efetivo é necessário explicar, sucintamente, os procedimentos envolvidos em etapas anteriores. Um esquema geral (mais resumido que a Figura 4.1) é apresentado abaixo, Figura 4.18, no qual no lado esquerdo têm-se os dados de entrada necessários e do lado direito têm-se os dados transferidos entre as partes (ou níveis) do programa.

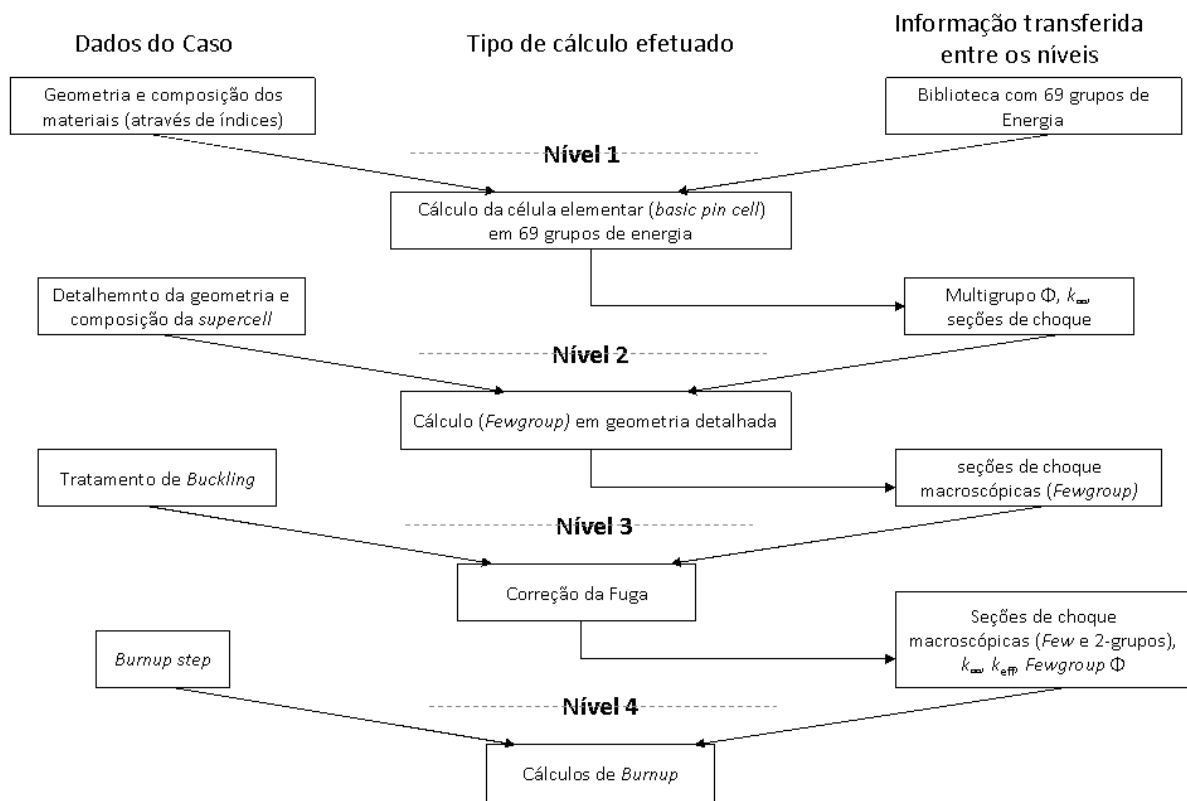


Figura 4.18 Fluxograma simplificado dos cálculos efetuados pelo código WIMSD. Tradução livre de [Kulikowska, 2000].

Inicialmente, o usuário deve definir os materiais que serão tratados pelo código (como combustível, como revestimento, como refrigerante e como moderador). Para uma célula unitária, a equação de transporte dos nêutrons é resolvida pelo método das probabilidades de

colisão<sup>21</sup>. A hipótese de fonte planar é assumida para cada uma das quatro regiões básicas. A seguir, cada uma delas é tratada como um anel, podendo ser subdividida ou não. Então, após alguns cálculos, os resultados do primeiro nível são: os fluxos multigrupo (para três ou quatro regiões) de uma célula representativa, uma estimativa do valor de  $k_{\infty}$  da célula unitária e as seções de choque macroscópicas (*fewgroups*) de todos os materiais.

Um reator real consiste em um sistema heterogêneo. Para definir apropriadamente as integrais de ressonância desse sistema, o código WIMSD usa uma aproximação baseada no princípio da equivalência [Kulikowska, 2000]. Esse princípio consiste na substituição de um problema heterogêneo por um homogêneo equivalente. Assim, o caso heterogêneo é tomado como equivalente a uma combinação linear de casos homogêneos. Para tanto, é necessário um conjunto de parâmetros determinados em função dos fatores de Bell e de Dancoff.

A integral de ressonância de um sistema heterogêneo,  $I_{het}$ , é calculada como uma combinação linear de integrais de sistemas homogêneos,  $I_{hom}$ , com argumentos modificados através dos fatores de Bell e de Dancoff combinados com características geométricas do combustível,

$$I_{het}(I_{hom}, \beta) = (1 - \beta)I_{hom}(\sigma_{pot} + B/\bar{r}) + \beta I_{hom}(\sigma_{pot} + (B\omega)/\bar{r}), \quad (4.21)$$

na qual  $\sigma_{pot}$  é a seção de choque microscópica potencial na região de combustível,  $B$  é o fator de Bell e  $\bar{r}$  é o comprimento de corda médio da região de combustível e  $\omega$  é dado por

$$\omega = \frac{1 - \psi}{B\psi + (1 - \psi)}, \quad (4.22)$$

na qual  $\psi$  é dado por

$$\psi = \frac{1 - C}{\beta}, \quad (4.23)$$

na qual  $C$  é o fator de Dancoff e  $\beta$  é dado por

---

<sup>21</sup> Detalhado na seção 3.1.

$$\beta = \frac{\left\{ \prod_{j=2}^{N_{REG}} (1 - P_{1j})^2 \right\}}{\left\{ \prod_{j=2}^{N_{REG}} (1 - P_{j-1,j})^2 \right\}}, \quad (4.24)$$

na qual  $P_{ij}$  é a probabilidade de um nêutron escapando da região  $i$  sofrer uma colisão na região  $j$ . O fator de Bell é calculado no código, se isso for requerido nas opções de entrada [Kulikowska, 2000], através da fórmula obtida por Beardwood, 1963,

$$B = \frac{1,0 + 2,71q}{1,0 + 2,34q}, \quad 4.25$$

na qual

$$q = \frac{0,5C}{(3,2N^{238} + \Sigma_{pot})r}, \quad 4.26$$

na qual  $B$  é o fator de Bell,  $C$  é o fator de Dancoff,  $N^{238}$  - *the U<sup>238</sup> number density*,  $\Sigma_{pot}$  é seção de choque macroscópica potencial e  $r$  é o raio da vareta combustível.

Nos casos analisados neste trabalho, o fator de Dancoff utilizado nas Equações 4.23 e 4.26 é escolhido pelo usuário. Nas opções de entrada, escolhe-se entre usar o fator de Dancoff assumindo absorção total ou usar o fator de Dancoff assumindo absorção parcial do combustível. Os resultados obtidos nesse segundo nível são levados adiante até chegar o momento de determinação do fator de multiplicação efetivo no nível 3, Figura 4.18.

## 5 RESULTADOS

Este capítulo dedica-se à análise dos resultados obtidos utilizando o método direto e o método probabilístico estocástico. As modificações foram implementadas no código WIMSD-4 através do software Fortran Lahey 77 Compiler, já que o código só pode ser executado através dessa versão. Para tanto, utilizou-se um microcomputador pessoal AMD Athlon XP 900 MHz com 512 MB de memória RAM e sistema operacional Windows98. Porém, salienta-se que os módulos criados para a determinação dos fatores de Dancoff são compatíveis com versões mais atuais da linguagem de programação Fortran.

### 5.1 Células Canadenses CANDU-37 e CANFLEX

Os fatores de Dancoff, assumindo-se absorção parcial do combustível, foram calculados para as células combustíveis canadenses para cinco posições distintas de varetas, ilustradas nas Figuras 4.10 e 4.11. Para viabilizar a comparação com os dados obtidos por Kim e Cho, 1999, a seção de choque macroscópica total do combustível,  $\Sigma_F$ , utilizada foi de  $0,20 \text{ cm}^{-1}$  e a seção de choque macroscópica total do revestimento,  $\Sigma_C$ , foi de  $0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

Os valores calculados, em função das seções de choque macroscópicas totais do moderador, são apresentados na Tabela 5.1 para CANDU-37 e na Tabela 5.2 para CANFLEX. Lembra-se que os resultados obtidos pelo Método Direto para a célula combustível CANDU-37, indicados pelo \* na Tabela 5.1, já haviam sido determinados anteriormente em trabalho desenvolvido por Jenisch Rodrigues, 2007.

Tabela 5.1 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) para cada posição de vareta, em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ , para células do tipo CANDU-37.

$\Sigma_M$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Posição 1		Posição 2		Posição 3		Posição 4		Posição 5	
	Direto*	MC	Direto*	MC	Direto*	MC	Direto*	MC	Direto*	MC
<b>0,0</b>	0,4144	0,4158	0,4059	0,4021	0,3551	0,3573	0,2599	0,2604	0,2598	0,2603
<b>0,2</b>	0,3390	0,3398	0,3210	0,3213	0,2792	0,2805	0,1961	0,1961	0,1950	0,1961
<b>0,4</b>	0,2861	0,2858	0,2627	0,2655	0,2279	0,2289	0,1564	0,1559	0,1543	0,1565
<b>0,6</b>	0,2464	0,2452	0,2201	0,2242	0,1907	0,1917	0,1291	0,1284	0,1263	0,1284
<b>0,8</b>	0,2152	0,2156	0,1877	0,1923	0,1624	0,1635	0,1093	0,1082	0,1059	0,1084
<b>1,0</b>	0,1901	0,1913	0,1625	0,1673	0,1402	0,1421	0,0943	0,0931	0,0904	0,0927
<b>1,2</b>	0,1694	0,1700	0,1423	0,1470	0,1224	0,1244	0,0825	0,0810	0,0782	0,0807

O tempo computacional despendido na geração das matrizes de probabilidades e no cálculo dos fatores de Dancoff pelo Método Direto, assumindo-se absorção total e parcial simultaneamente, foi de, aproximadamente, 13 minutos para CANDU-37 e de 14 minutos para CANFLEX [Jenisch Rodrigues et al., 2008a]. Por outro lado, pelo Método de Monte Carlo foram necessárias, aproximadamente, 3 horas para CANDU-37 e 3,3 horas para CANFLEX [Jenisch Rodrigues et al., 2008b]. O tempo médio gasto para o cálculo das matrizes de probabilidades, para cada seção de choque macroscópica total do moderador, foi de 1,5 minutos pelo Método Direto e de 23 minutos pelo Método de Monte Carlo.

Os gráficos das Figuras 5.1 e 5.2 foram construídos a partir da Tabela 5.1, já o gráfico da Figura 5.3 representa os valores obtidos pelo Método de Monte Carlo por Kim e Cho, 1999, para a célula combustível CANDU-37. Objetivando uma análise mais precisa na comparação entre eles, opta-se por atribuir a unidade secundária igual a 0,05 no eixo vertical. Apesar do gráfico da Figura 5.3 não possuir a mesma divisão, é notório que todos os três apresentam o mesmo comportamento.

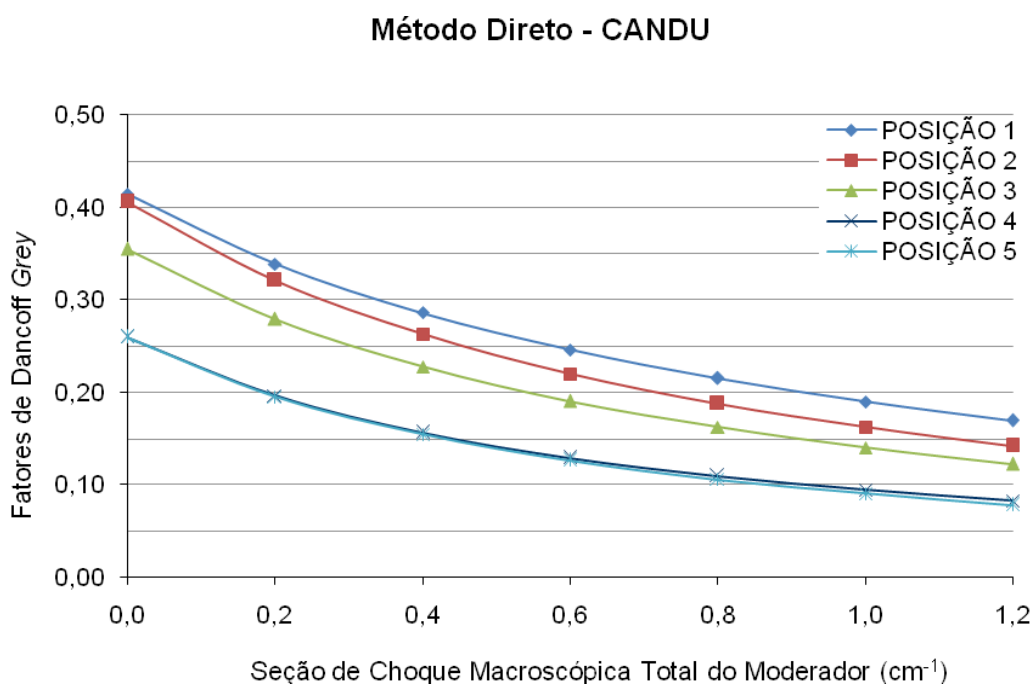


Figura 5.1 – Fatores de Dancoff determinados pelo Método Direto para a célula combustível CANDU-37, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$  [Jenisch Rodrigues, 2007].

As equações utilizadas para determinar as probabilidades de colisão no Método Direto são exatas. Logo, estão sujeitas apenas a erros de truncamento e arredondamento, oriundos do método numérico de integração utilizado (aproximação racional de Chebyshev). Essas probabilidades foram calculadas utilizando-se 64 pontos de quadratura nas integrais espaciais e 128 intervalos nas integrais angulares. No método probabilístico, o número mínimo de histórias utilizado foi de 20000 e o desvio-padrão máximo observado no cálculo das probabilidades foi de 0,00301 para CANDU-37 e de 0,00305 para CANFLEX [Jenisch Rodrigues et al., 2008b].

#### Método de Monte Carlo - CANDU

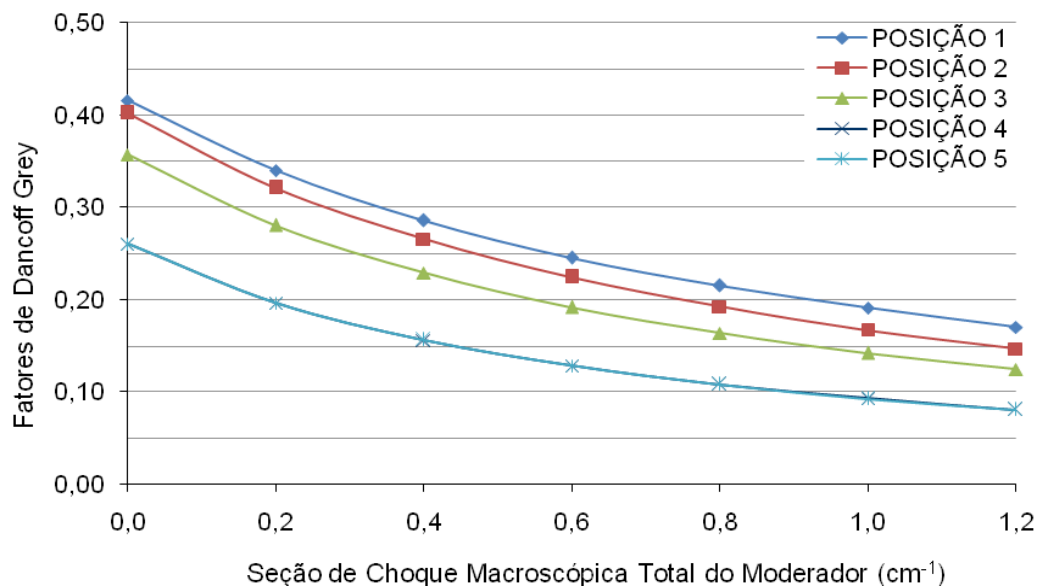


Figura 5.2 – Fatores de Dancoff determinados pelo Método de Monte Carlo para a célula combustível CANDU-37, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$  [Jenisch Rodrigues et al., 2008b].

A partir da observação conjunta dos dados (apresentados na Tabela 5.1) e do comportamento dos gráficos (Figuras 5.1 e 5.2) verifica-se que os fatores obtidos pelos dois métodos possuem valores muito próximos. Ou seja, os valores obtidos a partir das sub-rotinas PIJM e PIJMC se mostram em excelente concordância com aqueles apresentados na Figura 5.3. A maior diferença relativa foi de 3,3% para a posição 2, referente à seção de choque macroscópica total do moderador igual a  $1,2 \text{ cm}^{-1}$ , enquanto que a menor diferença relativa foi

de 0,005%, observada na posição 4, referente à seção de choque macroscópica total do moderador igual a  $0,2 \text{ cm}^{-1}$ .

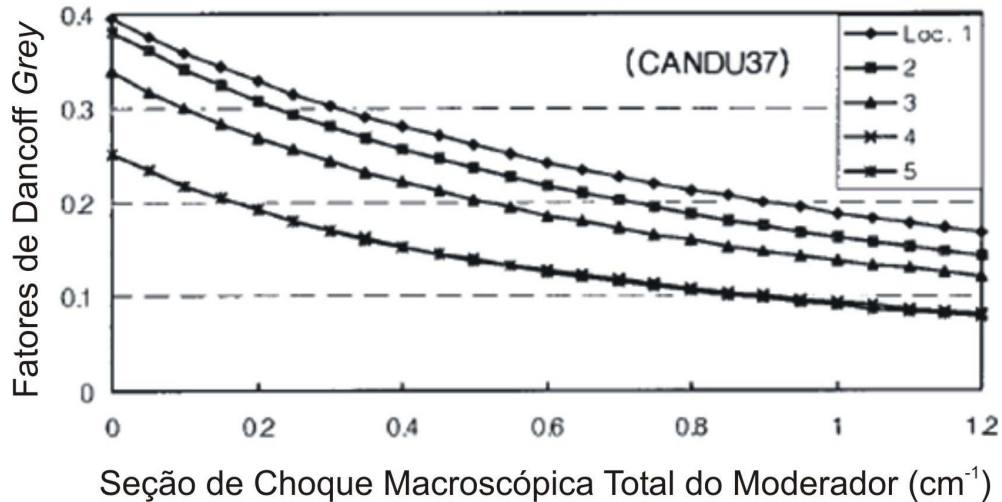


Figura 5.3 – Fatores de Dancoff para a célula combustível CANDU-37, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$  [Kim e Cho, 1999].

Sabe-se que o cálculo de fatores de Dancoff para reatores reais é mais difícil devido à não uniformidade encontrada ao redor das varetas absorvedoras e das barras de controle ou na irregularidade da localização das varetas combustíveis na célula [Kim e Cho, 1999]. Portanto, na comparação entre métodos, o cálculo dos fatores de Dancoff torna-se mais interessante quando as células utilizadas possuem varetas irregularmente dispostas ou com diâmetros diferentes, como a célula combustível CANFLEX.

Nesse caso, tem-se o mesmo comportamento verificado anteriormente para uma célula regular. Observando-se os dados apresentados abaixo, Tabela 5.2, percebe-se que os fatores obtidos pelos dois métodos possuem valores muito próximos. Isso evidencia a versatilidade do Método Direto, até o momento testado para o caso de células regulares. Agora, a maior diferença relativa foi de 3,7% para a posição 5, referente à seção de choque macroscópica total do moderador igual a  $1,2 \text{ cm}^{-1}$ . A menor diferença relativa foi de 0,006%, observada na posição 4, referente à seção de choque macroscópica total do moderador igual a  $0,0 \text{ cm}^{-1}$ . Ou seja, quando se simula a ausência de moderador.



Tabela 5.2 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) para cada posição de vareta, em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ , para células do tipo CANFLEX.

$\Sigma_M$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Posição 1		Posição 2		Posição 3		Posição 4		Posição 5	
	Direto	MC	Direto	MC	Direto	MC	Direto	MC	Direto	MC
<b>0,0</b>	0,4047	0,4067	0,3957	0,3917	0,3532	0,3549	0,2645	0,2645	0,2646	0,2643
<b>0,2</b>	0,3130	0,3129	0,3043	0,3037	0,2717	0,2727	0,1967	0,1961	0,1959	0,1961
<b>0,4</b>	0,2499	0,2492	0,2443	0,2455	0,2184	0,2193	0,1559	0,1553	0,1540	0,1553
<b>0,6</b>	0,2036	0,2056	0,2017	0,2046	0,1806	0,1815	0,1286	0,1277	0,1258	0,1276
<b>0,8</b>	0,1686	0,1701	0,1700	0,1732	0,1524	0,1534	0,1090	0,1081	0,1056	0,1079
<b>1,0</b>	0,1412	0,1430	0,1457	0,1494	0,1305	0,1316	0,0943	0,0928	0,0905	0,0932
<b>1,2</b>	0,1195	0,1202	0,1266	0,1300	0,1131	0,1148	0,0828	0,0815	0,0787	0,0816

Os gráficos dispostos nas Figuras 5.4 e 5.5 foram construídos a partir da Tabela 5.2. O gráfico da Figura 5.6 representa os valores obtidos no trabalho desenvolvido por Kim e Cho, 1999, através do Método de Monte Carlo para a mesma célula combustível. Assim como no caso anterior, opta-se por atribuir a unidade secundária igual a 0,05 no eixo vertical.

#### Método Direto - CANFLEX

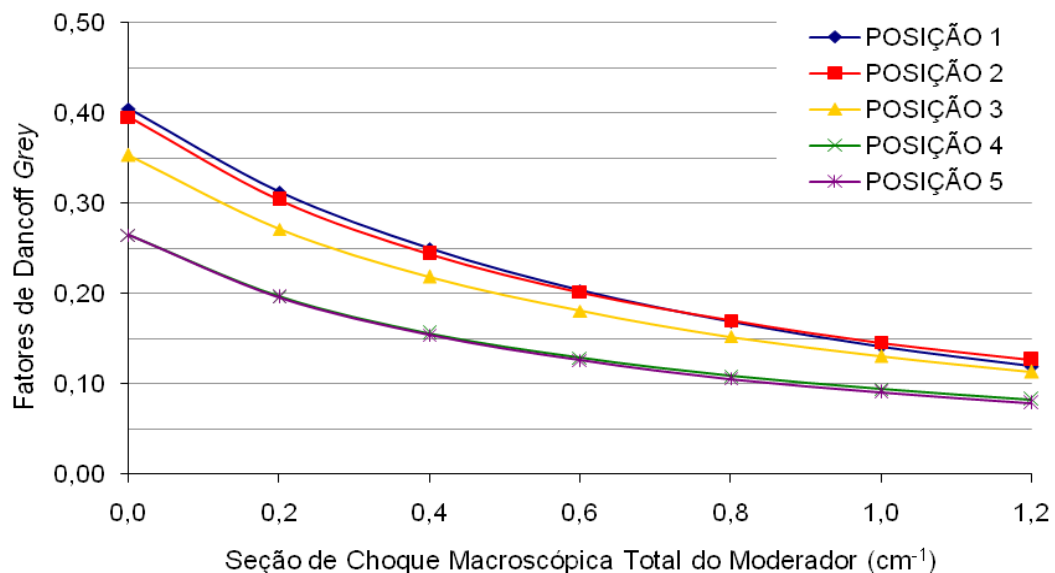


Figura 5.4 – Fatores de Dancoff determinados pelo Método Direto para a célula combustível CANFLEX, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$  [Jenisch Rodrigues et al., 2008a].

## Método de Monte Carlo - CANFLEX

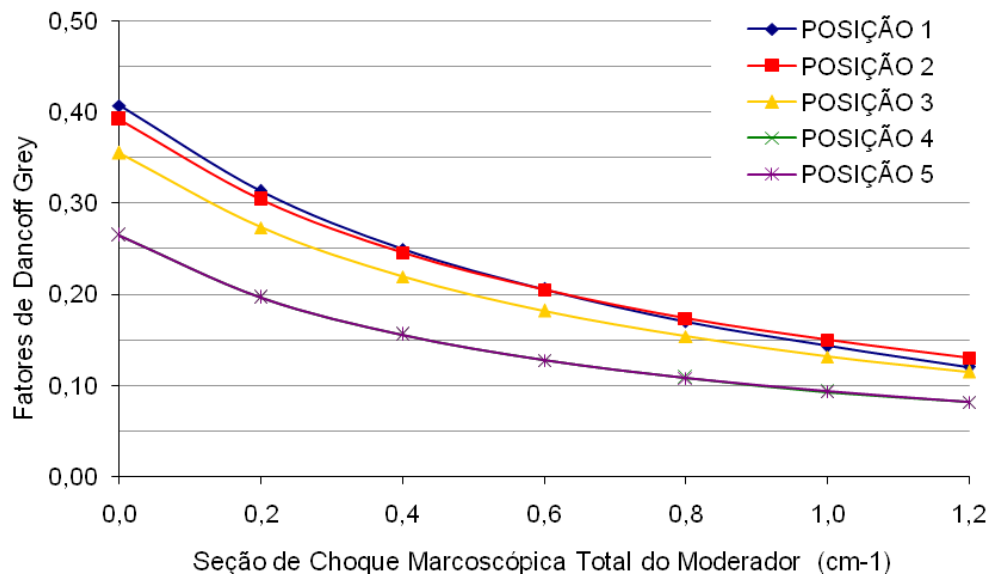


Figura 5.5 – Fatores de Dancoff determinados pelo Método de Monte Carlo para a célula combustível CANFLEX, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$  [Jenisch Rodrigues et al., 2008b].

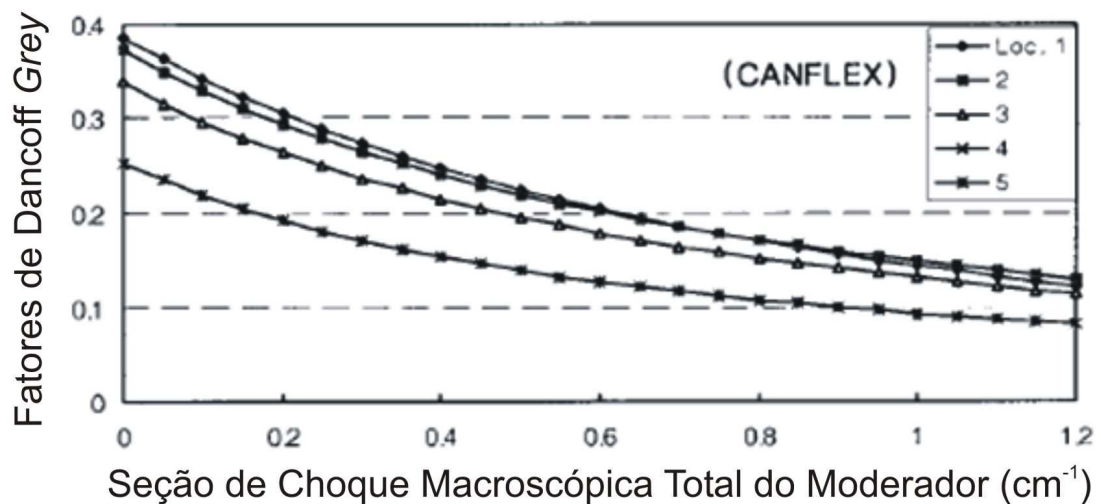


Figura 5.6 – Fatores de Dancoff para a célula combustível CANFLEX, assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$  [Kim e Cho, 1999].

Analisando-se os gráficos, Figuras 5.4 e 5.5, fica claro que ambos apresentam o mesmo comportamento. Isto é, os valores obtidos a partir das sub-rotinas PIJM e PIJMC se mostram muito próximos daqueles apresentados na Figura 5.6.

## 5.2 Análise de Convergência

Nesta seção, apresenta-se um estudo de convergência a partir da análise do comportamento assintótico entre a célula quadrada e sua equivalente cilíndrica quando ambas têm suas dimensões extrapoladas. Isto é, aumentando-se significativamente suas dimensões, espera-se que os fatores de Dancoff determinados nas duas configurações tendam para valores muito próximos. A condição que satisfaz a convergência dos valores é dada por uma célula combustível semelhante à original, porém com dimensões dez vezes maior, Figura 5.7. A comparação entre resultados é feita tanto pelo Método Direto [Jenisch Rodrigues et al., 2009], quanto pelo Método de Monte Carlo. No método probabilístico, o número mínimo de histórias utilizado foi de 20000. O desvio-padrão máximo observado no cálculo das probabilidades foi de 0,00321 para a célula quadrada e de 0,00210 para a célula cilíndrica equivalente, assumindo absorção total do combustível. Quando se usa a hipótese de absorção parcial do combustível, o desvio-padrão máximo observado foi de 0,00333 para a célula quadrada e de 0,00220 para a célula cilíndrica equivalente.

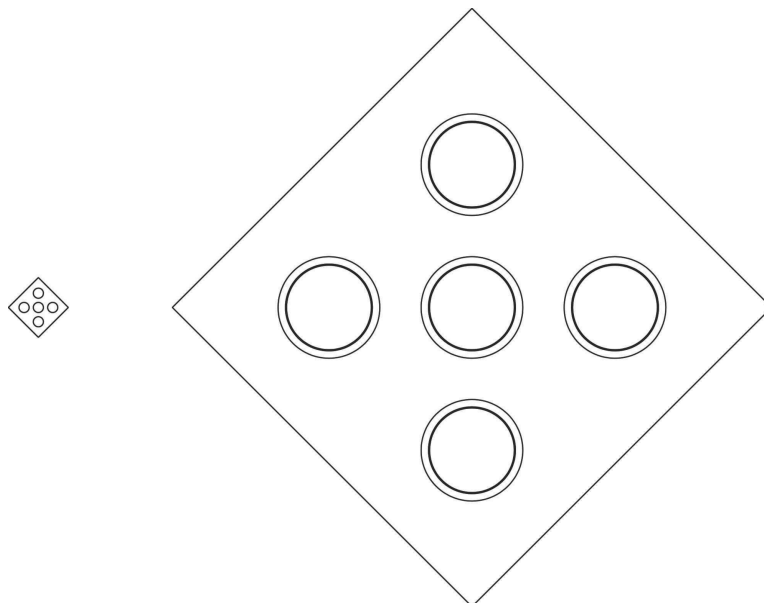


Figura 5.7 – Comparação entre a célula combustível original (esquerda) e a célula combustível utilizada no estudo de convergência (direita). Desenho em escala.

Fatores de Dancoff, assumindo absorção total e parcial no combustível, foram computados para a vareta central (posição 1) e para a vareta à sua direita (posição 2), Figura 5.7(direita). Os valores obtidos pelo Método Direto [Jenisch Rodrigues et al., 2009] são mostrados nas Tabela 5.3 e 5.5, enquanto que os valores obtidos pelo Método de Monte Carlo encontram-se nas Tabelas 5.4 e 5.6. Além disso, são usados gráficos para facilitar as comparações, Figuras 5.8 e 5.9.

Tabela 5.3 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método Direto [Jenisch Rodrigues et al., 2009].

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,077482	0,026899	0,078562	0,032613
<b>0,3</b>	0,046215	0,014005	0,046309	0,015364
<b>0,4</b>	0,027858	0,007778	0,027867	0,008132
<b>0,6</b>	0,010372	0,002687	0,010373	0,002714
<b>0,8</b>	0,003959	0,001001	0,003959	0,001003
<b>1,0</b>	0,001540	0,000386	0,001540	0,000387
<b>1,2</b>	0,000608	0,000152	0,000608	0,000152

Tabela 5.4 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,074567	0,027398	0,074113	0,036577
<b>0,3</b>	0,044326	0,014275	0,043385	0,017186
<b>0,4</b>	0,026645	0,007939	0,025949	0,009012
<b>0,6</b>	0,009874	0,002755	0,009552	0,002924
<b>0,8</b>	0,003753	0,001035	0,003606	0,001046
<b>1,0</b>	0,001455	0,000406	0,001388	0,000389
<b>1,2</b>	0,000573	0,000164	0,000543	0,000147

Observa-se, em ambos os métodos, que os resultados para a célula quadrada encontram-se muito próximos dos resultados obtidos para a célula cilíndrica equivalente. Para a posição 1, diferença relativa assume valores no intervalo compreendido entre 0,00% e 1,38% para o Método Direto e entre 0,61% e 5,57% para o Método de Monte Carlo. Na Figura 5.8, apresentam-se os gráficos construídos utilizando os valores das Tabela 5.3 e 5.4 para a posição 1.

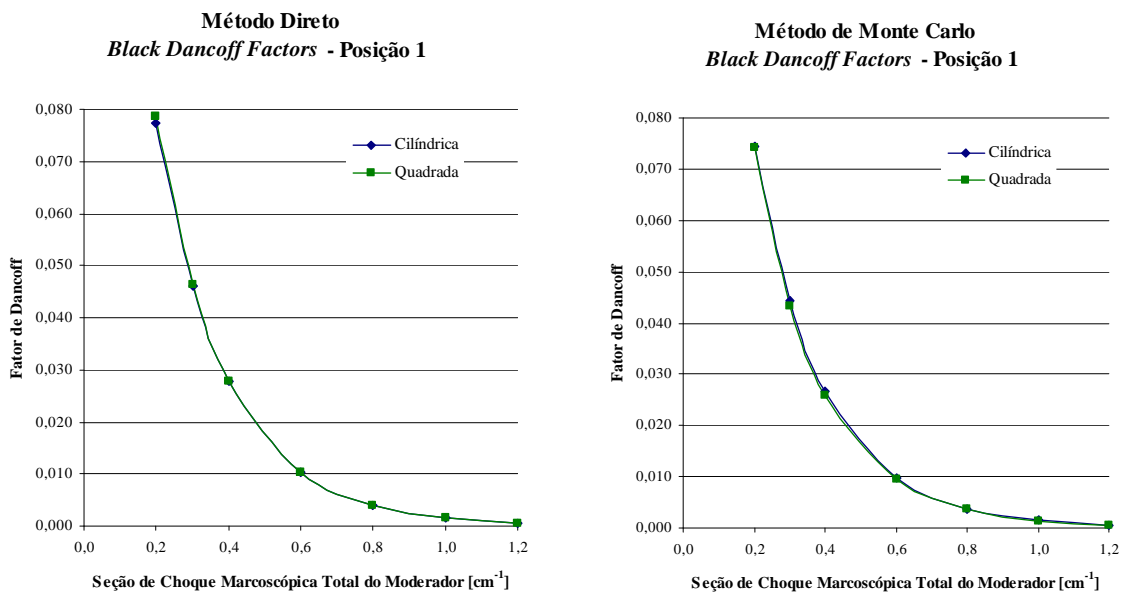


Figura 5.8 – Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 1), assumindo absorção total no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

Pelo Método Direto, para a posição 2, para valores de  $\Sigma_M$  acima de  $0,4 \text{ cm}^{-1}$ , a diferença relativa entre os resultados fica entre 0,01% e 4,35%. Pelo Método de Monte Carlo, essas diferenças ficam entre 1,04% e 11,91%. Acredita-se que o aumento na diferença relativa, observado no método probabilístico, deva estar relacionado ao número de histórias necessárias para a convergência.

O decréscimo significativo nessas diferenças, à medida que o valor de  $\Sigma_M$  aumenta, é observado nos resultados obtidos por ambos os métodos. Analisando-se a Figura 5.9, percebe-se que as curvas possuem o mesmo comportamento e que há diferenças mais aparentes apenas para pequenas seções de choque macroscópicas totais do moderador. Quanto menor é essa seção de choque, maior é a “sensibilidade” dos contornos, isto é, das varetas próximas às bordas.

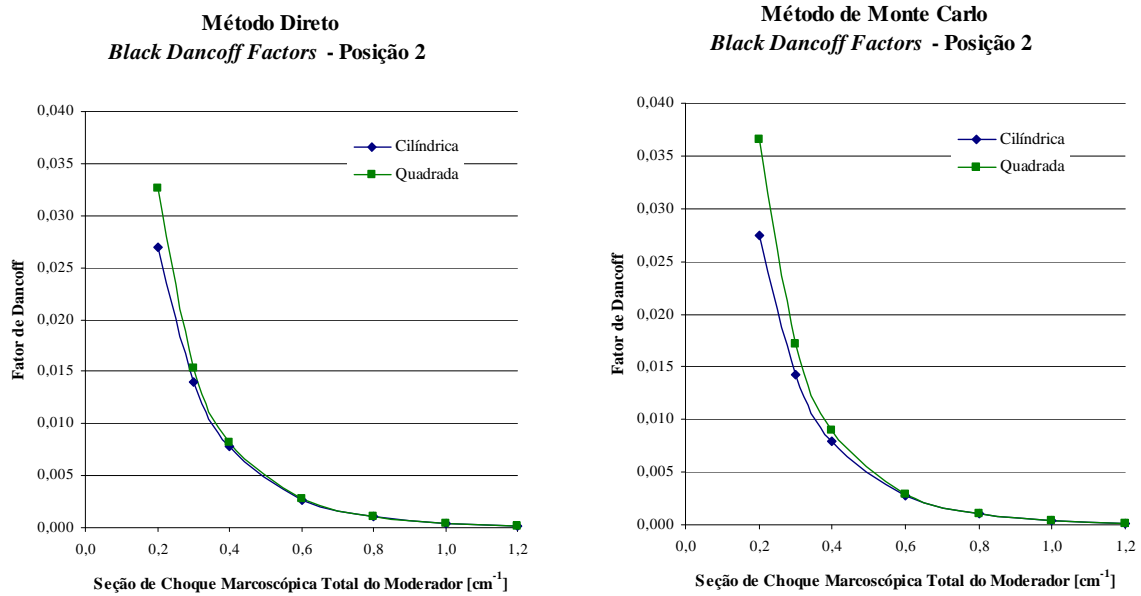


Figura 5.9 – Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 2), assumindo absorção total no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

O mesmo procedimento foi utilizado no caso em que se assume absorção parcial do combustível. Os resultados obtidos pelo Método Direto [Jenisch Rodrigues et al., 2009] encontram-se na Tabela 5.5, enquanto que os valores obtidos pelo Método de Monte Carlo encontram-se na Tabela 5.6.

Tabela 5.5 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método Direto [Jenisch Rodrigues et al., 2009].

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,057644	0,020262	0,058508	0,024506
<b>0,3</b>	0,034430	0,010532	0,034507	0,011531
<b>0,4</b>	0,020806	0,005850	0,020814	0,006110
<b>0,6</b>	0,007798	0,002027	0,007798	0,002047
<b>0,8</b>	0,002998	0,000759	0,002998	0,000761
<b>1,0</b>	0,001175	0,000295	0,001175	0,000295
<b>1,2</b>	0,000468	0,000117	0,000468	0,000117

Tabela 5.6 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível), em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ , para células com dimensões dez vezes maior. Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,057631	0,020189	0,058137	0,024397
<b>0,3</b>	0,034393	0,010494	0,034224	0,011406
<b>0,4</b>	0,020767	0,005828	0,020594	0,006013
<b>0,6</b>	0,007771	0,002019	0,007685	0,002003
<b>0,8</b>	0,002984	0,000757	0,002945	0,000742
<b>1,0</b>	0,001168	0,000294	0,001151	0,000288
<b>1,2</b>	0,000464	0,000117	0,000457	0,000114

Novamente, observa-se, em ambos os métodos, que os resultados obtidos para a célula quadrada encontram-se muito próximos dos resultados obtidos para a célula cilíndrica equivalente, Figura 5.10. A diferença relativa, para posição 1, assume valores no intervalo compreendido entre 0,00% e 1,48% para o Método Direto e entre 0,49% e 1,68% para o Método de Monte Carlo.

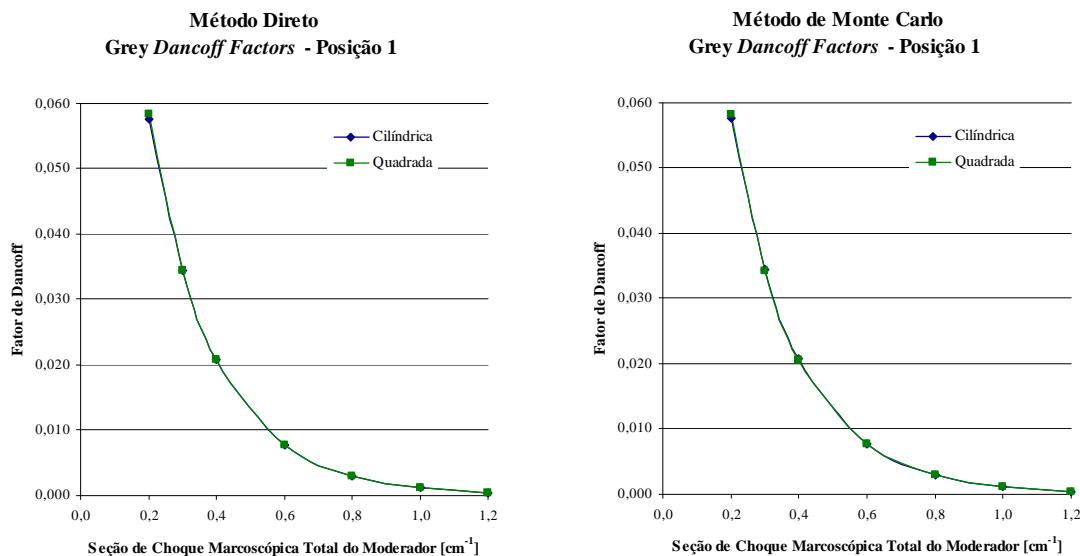


Figura 5.10 – Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 1), assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

Pelo Método Direto, para a posição 2, para valores de  $\Sigma_M$  acima de  $0,4\text{cm}^{-1}$ , a diferença relativa entre os resultados da célula quadrada e sua equivalente cilíndrica fica entre 0,01% e 4,26%. Pelo Método de Monte Carlo, essas diferenças ficam entre 0,84% e 3,08%. Observando-se a Figura 5.11, percebe-se que as curvas possuem o mesmo comportamento e que a maior diferença se encontra nas situações em que a seção de choque macroscópica total do moderador assume valores pequenos. Conforme mencionado anteriormente, quanto menor é essa seção de choque, maior é a “sensibilidade” dos contornos, isto é, das varetas próximas às bordas.

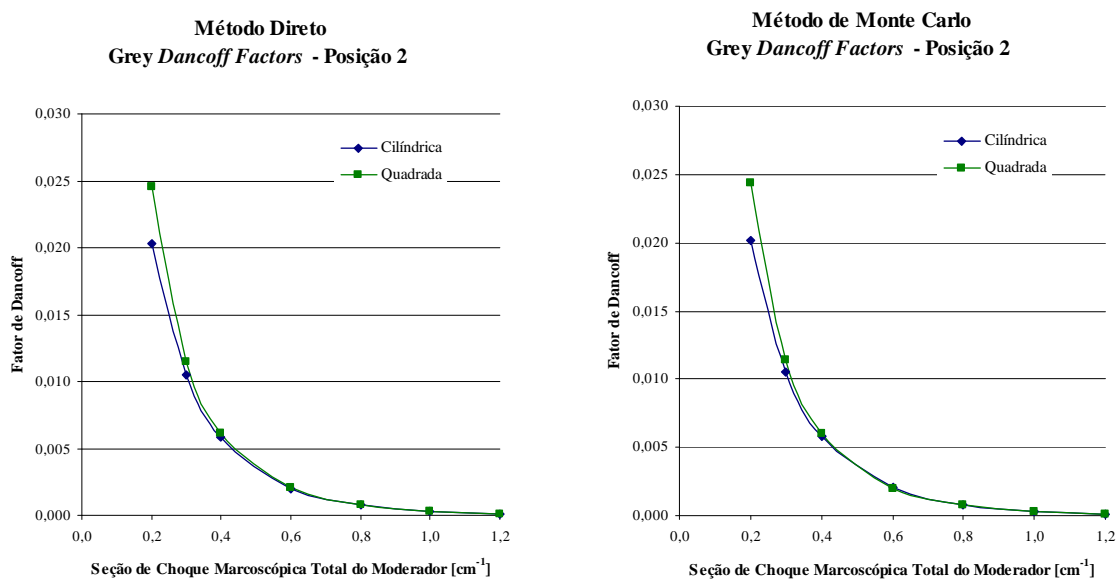


Figura 5.11 – Fatores de Dancoff para a célula combustível dez vezes maior (posição 2), assumindo absorção parcial no combustível, em função da seção de choque macroscópica total do moderador. Para o combustível e o revestimento têm-se  $\Sigma_F = 0,2\text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25\text{ cm}^{-1}$ .

O estudo de convergência desenvolvido se justifica uma vez que não há, na literatura especializada, resultados para fatores de Dancoff envolvendo esse tipo de configuração. Para a posição 2, é possível observar, através das tabelas, que existem diferenças significativas para valores de seções de choque macroscópicas totais do moderador,  $\Sigma_M$ , abaixo de  $0,4\text{cm}^{-1}$ . Logo, de maneira geral, pode-se afirmar que o comportamento assintótico esperado, para a célula quadrada e sua equivalente cilíndrica, é observado quando ambas têm suas dimensões extrapoladas.



### 5.3 Célula Hipotética de Seis Regiões

Visando analisar os efeitos da aproximação de Wigner-Seitz no cálculo dos fatores de Dancoff, são utilizadas as células apresentadas nas Figuras 4.12 e 4.13. Assim como nos casos anteriores, as seções de choque macroscópicas totais do combustível e do revestimento assumiram valores constantes –  $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$  (absorção total),  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  (absorção parcial) e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ . Foram simuladas três situações: a célula cilíndrica equivalente, a célula com contorno externo quadrado (com duas reflexões, valor *default* do código WIMSD-4) e a célula com contorno externo quadrado com quatro reflexões. Esses fatores foram obtidos através das duas metodologias de cálculo, direta e probabilística, e assumindo-se absorção total (Tabelas 5.7 e 5.8) e parcial do combustível (Tabelas 5.9 e 5.10). Os resultados são apresentados em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ .

Nesta seção são feitas duas análises. A primeira compara os valores obtidos pelos diferentes métodos, para cada configuração, com o objetivo de validar os resultados. As diferenças relativas entre os mesmos são tabeladas em função de  $\Sigma_M$ . A segunda compara os fatores de Dancoff obtidos para a célula quadrada com aqueles obtidos para a sua equivalente cilíndrica. São contabilizadas duas reflexões (*default* do código WIMSD) e quatro reflexões. Dessa forma é possível observar os efeitos da aproximação de Wigner-Seitz no cálculo desses fatores para a célula em questão.

Tabela 5.7 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método Direto.

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA		COM 4 REFLEXÕES	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,326845	0,180066	0,586500	0,475381	0,591104	0,497060
<b>0,3</b>	0,308307	0,163742	0,494994	0,385669	0,497073	0,395867
<b>0,4</b>	0,290956	0,149213	0,426906	0,319721	0,421867	0,324769
<b>0,6</b>	0,259447	0,124616	0,333701	0,230442	0,333917	0,231713
<b>0,8</b>	0,231682	0,104787	0,273461	0,173774	0,273513	0,174121
<b>1,0</b>	0,207146	0,088656	0,231176	0,135233	0,231189	0,135332
<b>1,2</b>	0,185410	0,075432	0,199467	0,107703	0,199470	0,107732

Tabela 5.8 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA		COM 4 REFLEXÕES	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,326291	0,181191	0,559272	0,485455	0,562393	0,502200
<b>0,3</b>	0,307747	0,164826	0,471960	0,395230	0,472590	0,400997
<b>0,4</b>	0,290396	0,150251	0,408392	0,328696	0,408100	0,329464
<b>0,6</b>	0,258893	0,125554	0,322368	0,238136	0,321647	0,235594
<b>0,8</b>	0,231137	0,105621	0,266573	0,180222	0,265871	0,177210
<b>1,0</b>	0,206613	0,089390	0,226858	0,140576	0,226228	0,137784
<b>1,2</b>	0,184891	0,076073	0,196609	0,112106	0,196049	0,109685

É possível observar, comparando-se os valores das Tabelas 5.7 e 5.8, que os fatores de Dancoff obtidos para cada configuração não diferem muito. Esses fatores apresentam diferenças relativas que figuram entre 0,17% e 4,93%, Tabela 5.9, o que indica boa concordância entre os resultados obtidos através de métodos diferentes para ambas as posições.

Tabela 5.9 – Diferenças relativas entre os fatores de Dancoff (assumindo absorção total no combustível), determinados por métodos diferentes, para as três configurações de células.

$\Sigma_M$	DIFERENÇAS RELATIVAS					
	CILÍNDRICA		QUADRADA		COM 4 REFLEXÕES	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,17	0,62	4,64	2,12	4,86	1,03
<b>0,3</b>	0,18	0,66	4,65	2,48	4,93	1,30
<b>0,4</b>	0,19	0,70	4,34	2,81	3,26	1,45
<b>0,6</b>	0,21	0,75	3,40	3,34	3,67	1,67
<b>0,8</b>	0,24	0,80	2,52	3,71	2,79	1,77
<b>1,0</b>	0,26	0,83	1,87	3,95	2,15	1,81
<b>1,2</b>	0,28	0,85	1,43	4,09	1,72	1,81

Observando-se as Figuras 5.12 e 5.13, nota-se que existe uma diferença relativa significativa entre os valores obtidos para a célula quadrada e os valores obtidos para sua equivalente cilíndrica. As mais expressivas figuram nas situações em que a seção de choque total do moderador possui pequenos valores. Por outro lado, para valores mais expressivos de

seção de choque macroscópica total do moderador, tem-se uma diferença proporcional a 7,05% pelo Método Direto e 5,69% pelo Método de Monte Carlo.

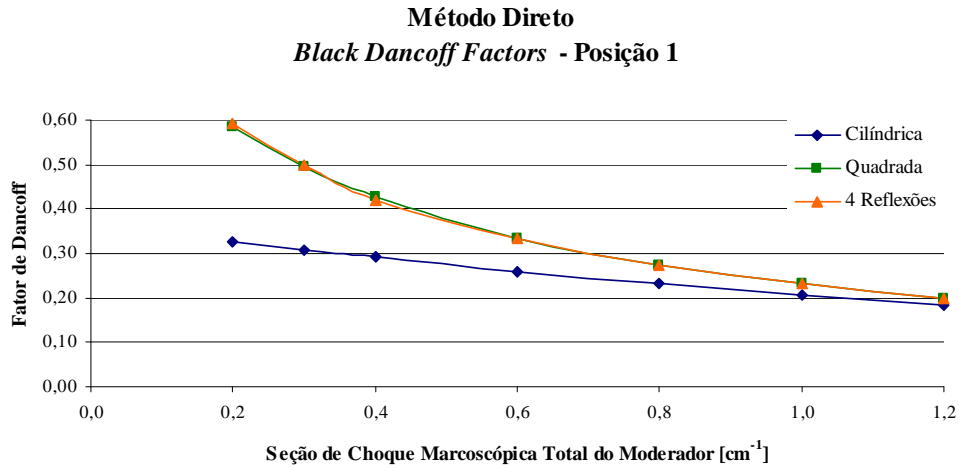


Figura 5.12 – Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método Direto com  $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

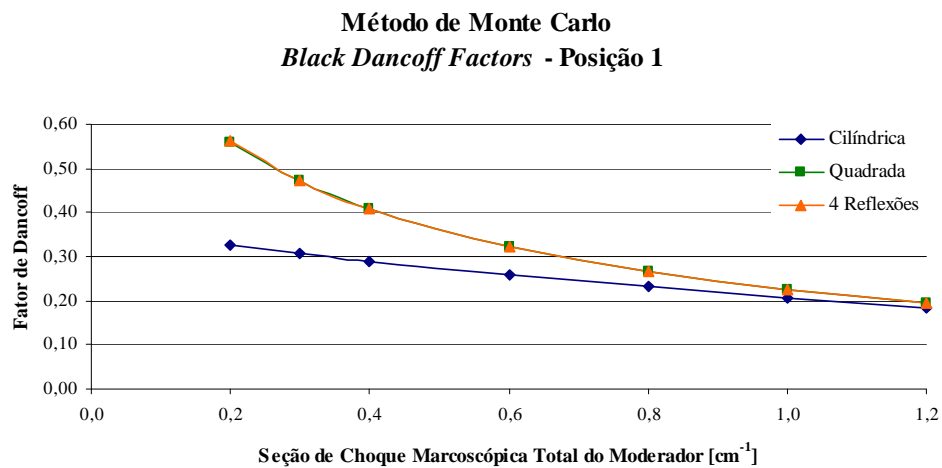


Figura 5.13 – Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com  $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

No caso da posição 2, as diferenças são ainda mais significativas, por volta de 30%, Figuras 5.14 e 5.15. Assim, para ambas as posições, os resultados começam a convergir, efetivamente, a partir de  $\Sigma_M = 1,0 \text{ cm}^{-1}$ .

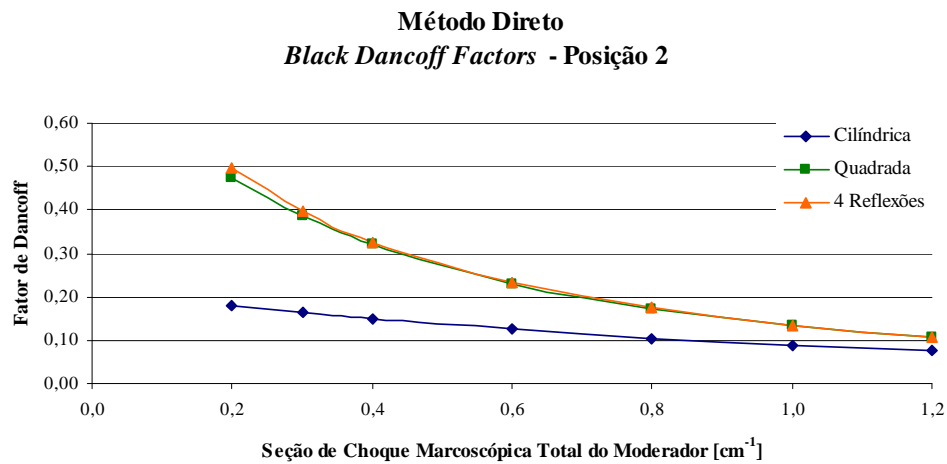


Figura 5.14 – Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método Direto com  $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

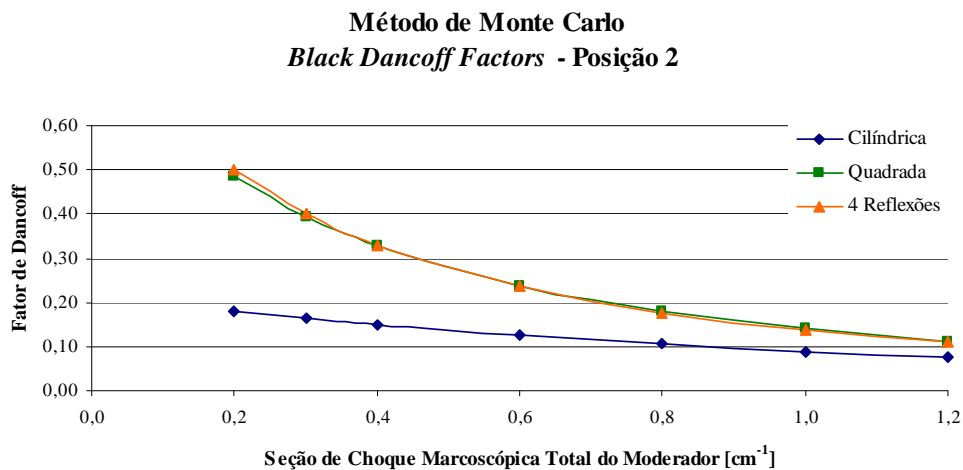


Figura 5.15 – Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção total no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com  $\Sigma_F = 25 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

De maneira análoga, determinam-se os fatores de Dancoff assumindo-se absorção parcial no combustível. Os valores obtidos, para as três configurações, encontram-se dispostos na Tabela 5.10 (Método Direto) e 5.11 (Método de Monte Carlo).

Tabela 5.10 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método Direto.

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA		COM 4 REFLEXÕES	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,049412	0,030771	0,114653	0,101504	0,131209	0,118450
<b>0,3</b>	0,045953	0,027408	0,089629	0,076890	0,096554	0,084015
<b>0,4</b>	0,042832	0,024544	0,072877	0,060298	0,075928	0,063454
<b>0,6</b>	0,037407	0,019925	0,052459	0,039964	0,053182	0,040657
<b>0,8</b>	0,032843	0,016382	0,040797	0,028415	0,040954	0,028584
<b>1,0</b>	0,028955	0,013604	0,033317	0,021200	0,033357	0,021244
<b>1,2</b>	0,025611	0,011391	0,028071	0,016371	0,028081	0,016383

Tabela 5.11 – Fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível) em função da variação da seção de choque macroscópica total do moderador,  $\Sigma_M$ . Resultados obtidos através do Método de Monte Carlo.

$\Sigma_M$	CILÍNDRICA		QUADRADA		COM 4 REFLEXÕES	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,049597	0,030652	0,104051	0,101710	0,117709	0,119017
<b>0,3</b>	0,046107	0,027296	0,082573	0,077083	0,088110	0,084486
<b>0,4</b>	0,042960	0,024439	0,068130	0,060468	0,070466	0,063852
<b>0,6</b>	0,037495	0,019834	0,050276	0,040084	0,050677	0,040934
<b>0,8</b>	0,032903	0,016303	0,039795	0,028490	0,039804	0,028780
<b>1,0</b>	0,028994	0,013535	0,032871	0,021242	0,032793	0,021388
<b>1,2</b>	0,025635	0,011331	0,027884	0,016387	0,027790	0,016492

É possível observar, através dos valores listados nas Tabelas 5.10 e 5.11, que os fatores de Dancoff obtidos para cada configuração não diferem muito. Esses fatores apresentam diferenças relativas que figuram entre 0,09% e 10,29%, Tabela 5.12, o que indica concordância razoável entre os resultados obtidos através de métodos diferentes para ambas as posições. As diferenças acima de 5% foram encontradas para a posição 1 da célula quadrada, nos casos em que a seção de choque macroscópica total do moderador é inferior a  $0,4\text{cm}^{-1}$ .

Tabela 5.12 – Diferenças relativas entre os fatores de Dancoff (assumindo absorção parcial no combustível), determinados por métodos diferentes, para as três configurações de células.

$\Sigma_M$	DIFERENÇAS RELATIVAS					
	CILÍNDRICA		QUADRADA		COM 4 REFLEXÕES	
	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2	Posição 1	Posição 2
<b>0,2</b>	0,37	0,39	9,25	0,20	10,29	0,48
<b>0,3</b>	0,33	0,41	7,87	0,25	8,75	0,56
<b>0,4</b>	0,30	0,43	6,51	0,28	7,19	0,63
<b>0,6</b>	0,24	0,46	4,16	0,30	4,71	0,68
<b>0,8</b>	0,18	0,48	2,45	0,26	2,81	0,69
<b>1,0</b>	0,14	0,51	1,34	0,20	1,69	0,68
<b>1,2</b>	0,09	0,53	0,67	0,10	1,04	0,67

Assim como no caso anterior, onde se assume absorção total no combustível, é possível observar que existe uma diferença relativa significativa entre os valores obtidos para a célula quadrada e sua equivalente cilíndrica, Figuras 5.16 e 5.17. As mais expressivas são encontradas nas situações em que a seção de choque macroscópica total do moderador possui pequenos valores. Por outro lado, para valores maiores, tem-se uma diferença proporcional a 8,76% pelo Método Direto e 7,76% pelo Método de Monte Carlo.

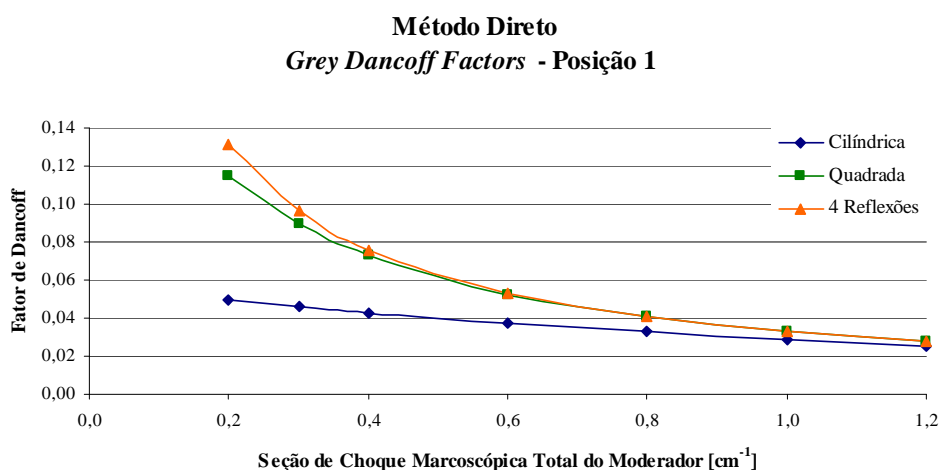


Figura 5.16 – Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método Direto com  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

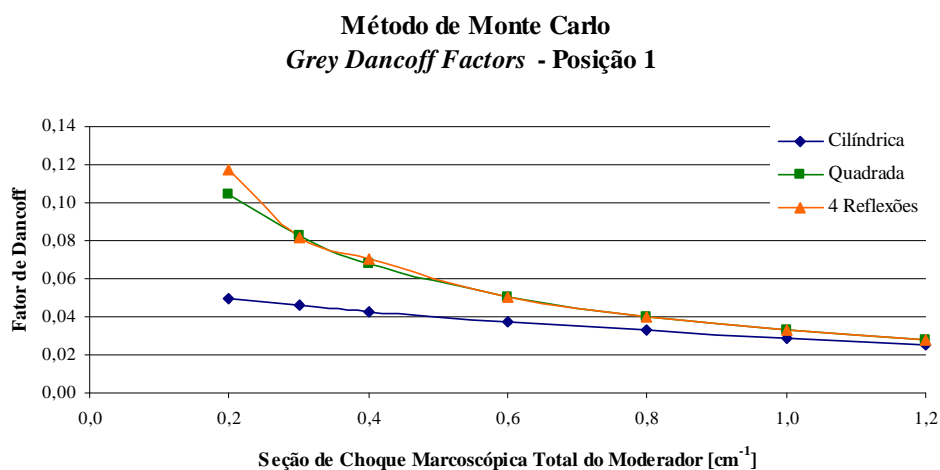


Figura 5.17 – Fatores de Dancoff, para a posição 1, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

Mais uma vez, verifica-se que os valores obtidos, para a célula quadrada e sua equivalente cilíndrica, começam a convergir a partir de  $\Sigma_M = 1,0 \text{ cm}^{-1}$ . Novamente, no caso da posição 2, as diferenças são mais significativas, por volta de 30%, Figuras 5.15 e 5.16.

No método probabilístico, o número mínimo de histórias utilizado foi de 20000. O desvio-padrão máximo observado no cálculo das probabilidades foi de 0,00331 para a célula quadrada, de 0,00344 para quatro reflexões e de 0,00211 para a célula cilíndrica equivalente, assumindo absorção total do combustível. Quando se usa a hipótese de absorção parcial do combustível, o desvio-padrão máximo observado foi de 0,00334 para a célula quadrada, de 0,00343 para quatro reflexões e de 0,00220 para a célula cilíndrica equivalente.

Em síntese, o comportamento observado nos resultados demonstra que os valores obtidos, por ambos os métodos, para cada configuração encontram-se em boa concordância. Logo, tem-se a validação desses valores, uma vez que se tratam de métodos independentes. Por outro lado, quando se comparam os fatores de Dancoff obtidos para a célula quadrada e aqueles obtidos para sua equivalente cilíndrica, tem-se uma diferença relativa significativa. Essa diferença é observada em ambos os métodos. Por se tratarem de metodologias de cálculo distintas, o comportamento que figura nos gráficos sugere que a aproximação de Wigner-Seitz, para a célula em questão, produz desvios consideráveis nos cálculos envolvidos na determinação dos fatores de Dancoff para pequenos valores de seção de choque macroscópica total do moderador.

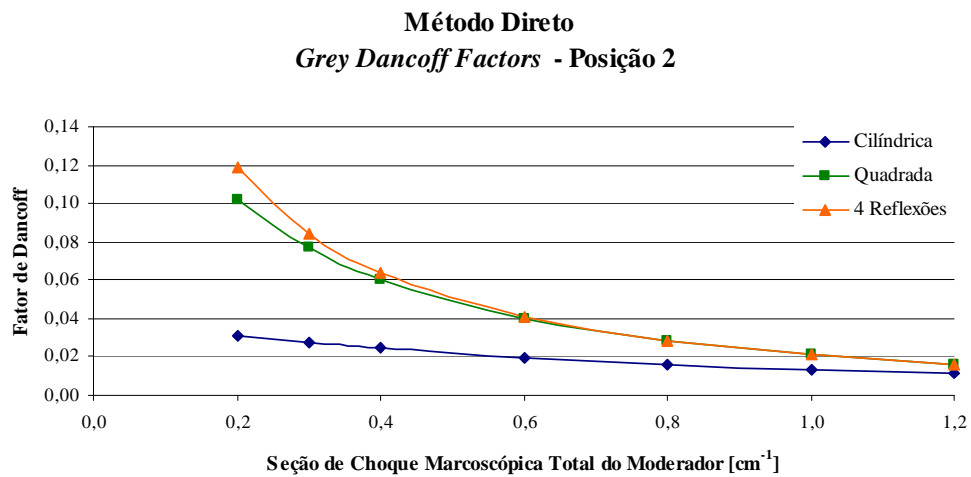


Figura 5.18 – Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método Direto com  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

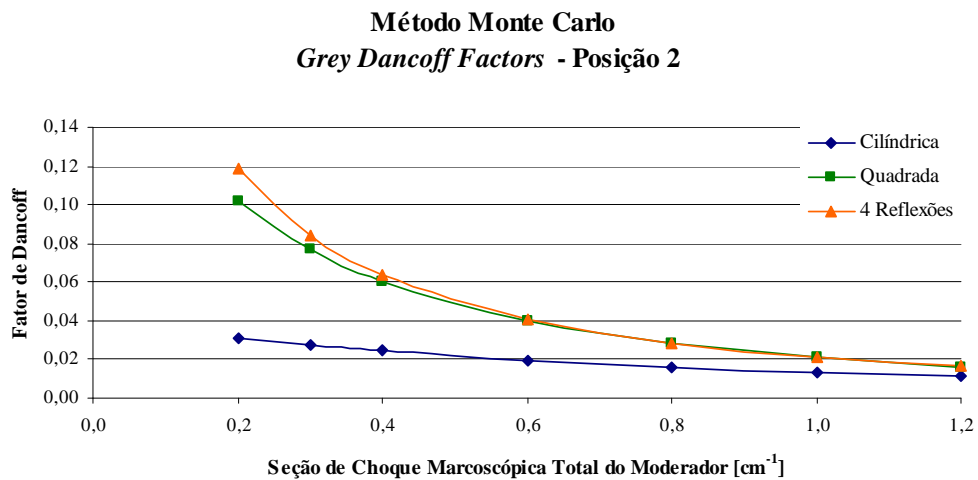


Figura 5.19 – Fatores de Dancoff, para a posição 2, assumindo absorção parcial no combustível. Obtidos pelo Método de Monte Carlo com  $\Sigma_F = 0,2 \text{ cm}^{-1}$  e  $\Sigma_C = 0,25 \text{ cm}^{-1}$ .

#### 5.4 O Fator de Multiplicação Efetivo das Células

O último objetivo do presente trabalho é a análise dos efeitos das variações dos fatores de Dancoff no fator de multiplicação efetivo,  $k_{eff}$ , das células combustíveis. Utilizando as mesmas configurações da seção anterior (célula cilíndrica, célula quadrada com duas



reflexões e célula quadrada com quatro reflexões) foram determinados os  $k_{eff}$ , assumindo tanto absorção total quanto parcial no combustível por ambas as metodologias de cálculo. Os valores calculados, bem como as diferenças relativas associadas, encontram-se dispostos nas Tabelas 5.13 a 5.16 abaixo. Conforme era esperado, não foram observadas modificações significativas.

Tabela 5.13– Valores obtidos para o  $k_{eff}$  no caso da célula original pelo Método Direto.

	<b>CILÍNDRICA</b>	<b>QUADRADA</b>	<b>COM 4 REFLEXÕES</b>
<b>Black</b>	1,000028	1,000028	1,000028
<b>Grey</b>	1,000025	1,000029	1,000028
<b>Dif. Rel.[%]</b>	0,0003	0,0001	0,0000

Tabela 5.14 – Valores obtidos para o  $k_{eff}$  no caso da célula original pelo Método de Monte Carlo.

	<b>CILÍNDRICA</b>	<b>QUADRADA</b>	<b>COM 4 REFLEXÕES</b>
<b>Black</b>	1,000028	1,000028	1,000028
<b>Grey</b>	1,000024	1,000028	1,000028
<b>Dif. Rel.[%]</b>	0,0004	0,0000	0,0000

Tabela 5.15 – Valores obtidos para o  $k_{eff}$  no caso da célula dez vezes maior pelo Método Direto.

	<b>CILÍNDRICA</b>	<b>QUADRADA</b>	<b>COM 4 REFLEXÕES</b>
<b>Black</b>	1,000028	1,000028	1,000028
<b>Grey</b>	1,000027	1,000026	1,000027
<b>Dif. Rel.[%]</b>	0,0001	0,0002	0,0001

Tabela 5.16 – Valores obtidos para o  $k_{eff}$  no caso da célula dez vezes maior pelo Método de Monte Carlo.

	<b>CILÍNDRICA</b>	<b>QUADRADA</b>	<b>COM 4 REFLEXÕES</b>
<b>Black</b>	1,000028	1,000028	1,000028
<b>Grey</b>	1,000026	1,000027	1,000029
<b>Dif. Rel.[%]</b>	0,0002	0,0001	0,0001

## 6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Na literatura especializada, os fatores de Dancoff são comumente obtidos a partir de algoritmos que utilizam o Método de Monte Carlo e o Método Direto. Em grande parte dos casos, células combustíveis com contorno externo quadrado ou hexagonal são substituídas por células cilíndricas equivalentes (aproximação de Wigner-Seitz) de mesmo volume. Sabe-se que o uso dessa célula equivalente superestima a razão entre os fluxos e subestima a absorção no moderador. Logo, a cilindrização da célula combustível pode não se aproximar do comportamento real esperado para um núcleo de reator. Além disso, esses fatores costumam ser apresentados apenas na forma gráfica, em função da seção de choque macroscópica total do moderador.

A presente tese propôs a validação de um novo Método Direto para a determinação de fatores de Dancoff, tão eficiente quanto o método probabilístico estocástico, para os casos mais gerais de células combustíveis. Estendeu-se o cálculo desses fatores para células combustíveis irregulares, com tamanhos diferentes de varetas (CANFLEX), visando à verificação da precisão do método. Os fatores de Dancoff determinados por esse novo método foram tabelados e também apresentados na forma gráfica, facilitando as comparações com os disponíveis na literatura.

Implementou-se, também, a hipótese de absorção parcial do combustível no cálculo desses fatores através do Método de Monte Carlo, utilizando o código WIMSD-4. A determinação dos mesmos, utilizando duas metodologias independentes de cálculo, proporcionou uma comparação mais efetiva. Conforme demonstrado na análise dos resultados, Capítulo 5, obteve-se uma excelente concordância entre os resultados calculados e os disponíveis na literatura.

Uma vez que os métodos utilizam metodologias de cálculo diferentes, conclui-se que ambas as sub-rotinas, PIJM e PIJMC, podem ser utilizadas para computar fatores de Dancoff, assumindo-se absorção parcial do combustível. Como já era esperado, o Método Direto mostrou-se consideravelmente mais rápido que o Método de Monte Carlo. Via de regra, esse último é indicado nos casos envolvendo geometrias mais complexas e para a determinação de *benchmarks*.

O próximo passo foi a determinação desses fatores para células combustíveis com contorno externo quadrado, assumindo-se absorção total e parcial do combustível. Entretanto, para efetuar esse cálculo, além das modificações inerentes à geometria da região mais externa,

o modelo considerou explicitamente as reflexões dos traços na superfície da célula (reflexão especular). Isso se justifica uma vez que a condição de reflexão difusa, *white*, adotada no cálculo das probabilidades de colisão em células com contornos externos cilíndricos, não mais se aplica nesse caso.

Para essa configuração, em nosso conhecimento, não existem valores disponíveis na literatura especializada. Portanto, a validação dos resultados se deu a partir da análise do comportamento assintótico entre a célula quadrada e sua equivalente cilíndrica quando ambas tem seu caminho médio extrapolado. Ou seja, aumentou-se significativamente as dimensões das células e verificou-se, conforme esperado, que os fatores de Dancoff determinados tendem para valores muito próximos em ambas as configurações. Finalmente, foram implementadas modificações visando à avaliação dos efeitos das variações desses fatores no fator de multiplicação efetivo,  $k_{eff}$ , das células. Conforme era esperado, não foram observadas modificações significativas.

Dessa forma, o Método Direto proposto neste trabalho consolida-se como uma ferramenta eficiente para o cálculo de fatores de Dancoff assumindo-se ambas as hipóteses de absorção no combustível, bem como para as condições de contorno reflexiva e *white*. Destaca-se o ganho computacional obtido com o método e a portabilidade do mesmo, que permite fácil adaptação a outros códigos de cálculo de células unitárias. As mesmas simulações, através do método de Monte Carlo, necessitam de no mínimo vinte mil histórias para convergir, o que demanda um tempo computacional significativo. Além disso, cada configuração diferente implica em um novo algoritmo.

Como sugestão para trabalhos futuros, propõe-se rever o cálculo das integrais de ressonância e da criticalidade do código WIMSD em geometria *cluster*, em termos dos fatores de Dancoff calculados, discutindo os modelos de integrais de ressonância de pinos, utilizados nessa geometria.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

AECL – Atomic Energy of Canada Limited. Disponível em: < <http://www.aecl.ca>>. Acesso em janeiro de 2009.

Askew, J. R., Fayers, F. J., Kemshell, P. B. A general description of the lattice code WIMS. **J.B.N.E.S.**, v. 5, p. 564–585, 1966.

Barros, R. C. Material utilizado no curso **Condições de Contorno do tipo Albedo.** Ministrado no Instituto de Matemática da UFRGS, 09 a 11 de janeiro de 2007.

Beardwood, J. E. PIJ, A Computer Programme for the Calculation of Collision Probabilities, **AEEW-R440**, 1963.

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

Bogado Leite, S. Q. Improvements in Calculating Collision Probabilities in Cluster Geometry. **Kerntechnik**, v. 65, n. 5–6, p. 245–249, 2000.

Bogado Leite, S. Q. Collision probability calculation in cluster lattices with square outer boundaries. **Kerntechnik**, v. 66, n. 4, p. 182–186, 2001.

Bogado Leite, S. Q. Determinação de Probabilidades de Colisão em Geometria Cluster pelo Método de Monte Carlo. **Revista Brasileira de Pesquisa e Desenvolvimento**, v. 4 n. 1, p. 5–13, 2003.

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

Bogado Leite, S. Q., Zabadal; J. R. S., Vilhena, M. T. Fatores de Dancoff em Geometria Cluster pelo Método de Monte Carlo e Comparações com o Método Direto. **Revista Brasileira de Pesquisa e Desenvolvimento**, v. 6, n. 3, p.122–126, 2004b.

Bruce – Bruce Center for energy research and information. Disponível em: < <http://www.friendsofbruce.ca/CANDU-37bundle.htm>>. Acesso em janeiro de 2009.

Carlvik I. A method for calculating collision probabilities in general cylindrical geometry and applications to flux distributions and Dancoff factors. In: Proc. Intern. Conf. Peaceful Uses At. Energy, Geneva, 1965. **Anais**. Geneva: 1965.v. 2, pp. 225–231.

Carlvik I. The Dancoff Correction in Square and Hexagonal Lattices. **Nuclear Science and Engineering**, v. 29, p. 325–336, 1967.

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

Duderstadt, J. J., Hamilton, L. J. Nuclear Reactor Analysis. Ed John Wiley & Sons, Inc, United States of America, 1942.

Fehér, S., Hoogenboom, J. E., Leege, P. F. A., Valkó, J. Monte Carlo Calculation of Dancoff Factors in Irregular Geometries. **Nuclear Science and Engineering**, v.117, p.227–238, 1994.

Gaelzer, R. **Apostila do Curso de Introdução à Física Computacional**. Disponível em <<http://minerva.ufpel.edu.br/~rudi/grad/ModComp/MetNum/Integracao.pdf>>. Acesso em janeiro de 2011.

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

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

Jenisch Rodrigues, L. **Cálculo dos fatores de Dancoff com absorção parcial de nêutrons em geometria cluster pelo Método Direto**. 66 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.

Jenisch Rodrigues, L., Bogado Leite, S. Q., Vilhena, M. T. Deterministic calculation of grey Dancoff factors in cluster cells with cylindrical outer boundaries. **Kerntechnik**, v. 73, n. 4, p. 179–183, 2008a.

Jenisch Rodrigues, L., Bogado Leite, S. Q., Vilhena, M. T. Validation of direct grey Dancoff factors results for cylindrical cells in cluster geometry by the Monte Carlo method. In: Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering, ENCIT, 12., 2008b, Belo Horizonte. **Livro de resumos**. 1 Pen Drive.

Jenisch Rodrigues, L., Bogado Leite, S. Q., Vilhena, M. T. Asymptotic Equivalence of Dancoff Factors in Cylindrical and Square Fuel Cells. In: International Nuclear Atlantic Conference, INAC, 2009, Rio de Janeiro. **Livro de resumos**. 1 DVD.

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

Kulikowska, T. Reactor Lattice Codes. Workshop on Nuclear Data and Nuclear Reactors: Physics, Design and Safety. Trieste, April, p. 462–480, 2000.

Moreira, M. A. **Mapas Conceituais e Diagramas V**, Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2006.

Nordheim, L. W. A New Calculation of Resonance Integrals. **Nuclear Science and Engineering**, v. 12, p. 457–463, 1962.

Sugimura, N., Yamamoto, A. Evaluation of Dancoff Factors in Complicated Geometry using the Method of Characteristics. **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 43, n. 10, p. 1182–1187, 2006.

Wigner, E. P., Creutz, E., Jupnik, H., E Snyder, T. Resonance Absorption of Neutrons by Spheres. **Journal of Applied Physics**, v. 26, n. 3, p. 260–270, 1955.

## APÊNDICE A – Diagrama “V” da Tese

Segundo Moreira, 2006, D. B. Gowin, originalmente, propôs esse “V” como um instrumento heurístico para a análise da estrutura do processo de produção de conhecimento (entendida como as partes desse processo e a maneira como se relacionam) ou para "desempacotar" conhecimentos documentados sob a forma de artigos de pesquisa, livros, ensaios, etc. Acredita-se que a utilização dessa ferramenta na composição da tese é de extrema relevância. Na Figura A1 apresenta-se o diagrama V construído para este trabalho. Abaixo, explica-se sucintamente como se dá a construção desse diagrama. Os trechos transcritos a seguir foram extraídos de Moreira, 2006.

“(...) o processo de pesquisa, segundo a perspectiva de Gowin, tem a ver com a conexão entre eventos, fatos e conceitos. (...) esta conexão pode ser vista como tendo a forma de um Vê ligando eventos, na ponta do Vê, a conceitos e fatos em cada um dos lados. O lado esquerdo se refere a conceitos e sistemas conceituais (i.e., ao domínio conceitual do processo de investigação): ali se encontram os conceitos, propriamente ditos, e os sistemas conceituais usados na pesquisa, os quais geram princípios e leis que, por sua vez, dão origem a teorias. Subjacentemente às teorias estão determinados sistemas de valores, visões de mundo ou filosofias. Este lado do Vê corresponde ao “pensar” da pesquisa.

Na base do Vê estão os eventos que acontecem naturalmente, ou que o pesquisador faz acontecer a fim de fazer registros através dos quais os fenômenos de interesse possam ser estudados. Obviamente, às vezes o fenômeno de interesse é estudado através de objetos e não de eventos, mas nesse caso pode-se dizer que o evento é o objeto.

O lado direito do Vê tem a ver com fatos nos três sentidos propostos por Gowin: eventos, registros e asserções. Este lado pode ser chamado de “domínio fatural”, mas Gowin prefere chamá-lo de “domínio metodológico”, pois nele se encontra toda a “metodologia” da produção de conhecimento. A partir dos registros dos eventos chega-se a dados, os quais sofrem transformações metodológicas que servem de base para a formulação de asserções de conhecimento (o conhecimento produzido, repostas a questões investigadas) e asserções de valor (qual o valor do conhecimento produzido?). Esse lado do Vê corresponde ao “fazer” da pesquisa; observe-se que tudo que é feito no lado metodológico do Vê é guiado por conceitos, princípios, teorias e filosofias, ou seja, pelo domínio conceitual.

Por outro lado, novas asserções de conhecimento podem levar a novos conceitos, à reformulação de conceitos já existentes, ou, ocasionalmente, a novas teorias e filosofias. Isto é, existe uma constante interação entre os dois lados do Vê. Essa interação é necessária para



que se chegue a respostas às questões básicas formuladas sobre os eventos que acontecem naturalmente ou que se faz acontecer.

As questões básicas – questões-chave ou questões-foco – estão no centro do Vê porque, a rigor, pertencem tanto ao domínio metodológico como ao conceitual. A questão básica de um estudo é aquela que não somente pergunta alguma coisa mas também diz algo. É a questão que identifica o fenômeno de interesse de tal forma que é provável que alguma coisa seja descoberta, medida ou determinada ao responder essa questão. É a pergunta que informa sobre o ponto central de um trabalho de pesquisa; diz o que, em essência, foi investigado” [Moreira, 2006].

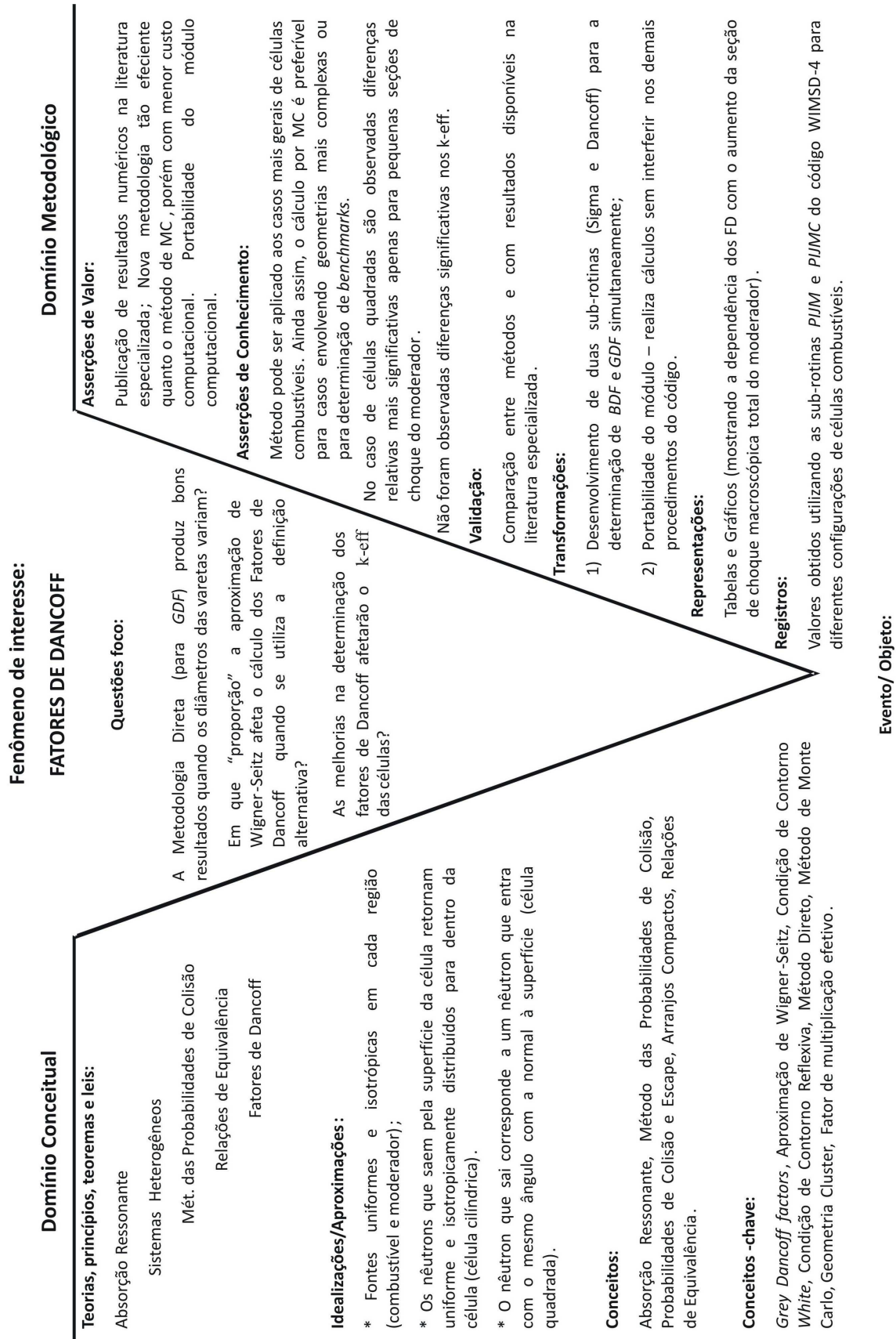


Figura A1 – Diagrama “V” da Tese Fatores de Dancoff de células unitárias em geometria *cluster* com absorção parcial de nêutrons.