

**ATTENTION MICROFICHE USER,**

The original document from which this microfiche was made was found to contain some imperfections that reduce full comprehension or some of the text despite the good technical quality of the microfiche itself. The failures may be:

- missing or illegible pages/figures;
- wrong pagination;
- poor overall printing quality, etc...

We normally refuse to microfiche such a document and request a replacement document (or page) from the national INIS Centre concerned. However, our experience shows that many months pass before such documents are replaced. Sometimes the Centre is not able to supply a better copy or, in some cases, the pages that were supposed to be missing correspond to a wrong pagination only. We feel that it is better to proceed with distributing the microfiche made of these documents than to withhold them till the imperfections are removed. If the removals are subsequently made then replacement microfiche can be issued. In line with this approach then, our specific practice for microfiching such documents is as follows:

1. A microfiche of an imperfect document will be marked with a special symbol (black circle) on the left of the title. This symbol will appear on all masters and copies of the document (1st fiche and trailer fiches) even if the imperfection is on one fiche of the report only.
2. If the incorrectnesses are not too general the reason will be specified on a sheet such as this, in the space below.
3. The microfiche will be considered as temporary, but sold at the normal price. Replacements, if they can be issued, will be available for purchase at the regular price.
4. A new document will be requested from the supplying Centre.
5. If the Centre can supply the necessary pages/document a new master fiche will be made to permit production of any replacement microfiche that may be required.

-----  
The original document from which this microfiche has been prepared has these imperfections:

- missing pages/figures-numbered: 131 ,
- wrong pagination
- poor overall printing quality
- combinations of the above
- other

INIS Clearinghouse  
I.A.E.A.  
P.O. Box 100  
A-1400, VIENNA  
AUSTRIA

BR 9127168  
INIS-BR -- 2662

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

ANÁLISE DE TRANSMUTAÇÃO CONSIDERANDO O TRATAMENTO EXPLÍCITO  
DOS PRODUTOS DE FISSÃO NUM SISTEMA ACOPLADO, COMPOSTO  
PELOS CÓDIGOS HAMMER-TECHNION E CINDER-2.

ALFREDO YUUITIRO ABE

Dissertação apresentada como parte dos  
requisitos para obtenção do grau de  
'Mestre na Área de Concentração em  
Reatores Nucleares de Potência e  
Tecnologia do Combustível Nuclear''.

Orientador: Dr. Adimir dos Santos

SÃO PAULO

1990



**ANALISE DE TRANSMUTAÇÃO CONSIDERANDO O TRATAMENTO  
EXPLÍCITO DOS PRODUTOS DE FISSÃO NUM SISTEMA ACOPLADO,  
COMPOSTO PELOS CÓDIGOS HAMMER-TECHNION E CINDER-2.**

**ALFREDO YUUITIRO ABE**

**R E S U M O**

Neste Trabalho apresenta-se um estudo a respeito da absorção de neutrons pelos produtos de fissão em reatores tipo PWR. Para tal desenvolveu-se um esquema de tratamento dos produtos de fissão explicitamente em cálculo celular acoplando os códigos HAMMER-TECHNION e CINDER-2. Os produtos de fissão considerados são responsáveis por cerca de 99% das absorções de neutrons calculadas pelo código CINDER-2 original e são tratados explicitamente através de suas cadeias lineares. Paralelamente ao tratamento explícito foi montada uma biblioteca em forma de multigrupo do código HAMMER-TECHNION para estes produtos de fissão utilizando a biblioteca de dados nucleares básico ENDF/B-V através do sistema NJOY e AMPX-II. Este esquema foi avaliado através de dois "benchmark" disponíveis onde obtendo-se excelentes resultados no valor do parâmetro K-infinito(IAEA-TECDOC-233) em função da queima e enriquecimento, e nos valores de barns por fissão(OKAZAKI e SOKOLOWSKI) para 2200 m/s. Este trabalho contribui na área de cálculo de reatores mostrando uma metodologia para analisar e considerar o efeito dos produtos de fissão de uma forma explícita em cálculos celulares; acessar e verificar o desempenho da biblioteca básica de dados nucleares ENDF/B-V dos produtos de fissão.

**TRANSMUTATION ANALYSIS CONSIDERING AN EXPLICIT  
FISSION PRODUCT TREATMENT BASEAD ON A  
COUPLED HAMMER-TECHNION AND CINDER-2 SYSTEM**

**ALFREDO YUUITIRO ABE**

**A B S T R A C T**

This work presents a study about neutron absorption in a typical PWR cell by considering an explicit treatment for the fission products. The proposed methodology to treat fission product neutron absorption in a lattice calculation combines the HAMMER-TECHNION and CINDER-2 codes. The fission product chain treatment considers nearly 99% of all original CINDER-2 neutron absorption chain treatment. Parallel to the explicit treatment, a cross section library in the HAMMER-TECHNION code multigroup structure for the fission products was generated using the ENDF/B-V fission product library and processed by NJOY and AMPX-II processing codes. The methodology validation was investigated against two available benchmarks and it was obtained excellent results for the K-Infinity(IAEA-TECDOC-233) as function of burnup and enrichment and for the aggregate quantity  $\sigma_{2200}$  in units of barns/fission cross sections (OKAZAKI and SOKOLOWSKI). This work contributed for a better understanding of the fission product neutron absorption in a typical PWR cell and showed that the explicit fission product treatment can be successfully achieved. Besides that the performance of the ENDF/B-V fission product library was accessed.

## AGRADECIMENTOS

- A COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR (IPEN-CNEN/SP) pelo apoio material, sem o qual não teria sido possível a realização deste trabalho.

- A COORDENADORIA DE PROJETOS ESPECIAIS (COPESP - MINISTERIO DA MARINHA) pelo apoio material e financeiro, sem o qual não teria sido possível a realização deste trabalho.

- Ao Dr. Adimir dos Santos pela valiosa orientação no Trabalho., pela amizade e compreensão.

- Ao Gelson Toshio Otani, Lucia Estela Menegatti, Emilia Nakamura e Edna Maria Lopes pelo apoio computacional no CDC-CYBER e IBM-4381.

- A todos os colegas da RTF que direta ou indiretamente participaram deste Trabalho.

- Aos colegas de pós-graduação : Antonio Bechior Jr., Almir Fernandes, Marco Antonio Fernandes (Barbosa), Marco Roberto Rossini e Miriam Medeiros da Silva pelas criticas e sugestões.

## **INDICE**

	<b>Pág.</b>
<b><u>CAPITULO 1</u></b>	
1.1 INTRODUÇÃO .....	7
1.2 HISTORICO .....	9
1.3 PSEUDO PRODUTO DE FISSAO .....	11
1.4 OBJETIVO E DIVISAO DO TRABALHO .....	17
<b><u>CAPITULO 2</u></b>	
2.1 TEORIA DE TRANSMUTACAO NUCLEAR .....	21
2.2 SISTEMA DE EQUACOES DE TRANSMUTACAO E TRANSPORTE DE NEUTRONS .....	28
2.3 ANALISE DAS CADEIAS DE TRANSMUTACAO .....	32
<b><u>CAPITULO 3</u></b>	
3.1 INTRODUÇÃO .....	49
3.2 MAIORES ABSORVEDORES DE NEUTRONS .....	50
<b><u>CAPITULO 4</u></b>	
4.1 SISTEMA HAMMER-TECHNION/CINDER-2 .....	79
4.2 BIBLIOTECA DOS PRODUTOS DE FISSAO .....	85

## **CAPITULO 5**

<b>5.1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>95</b>
<b>5.2 BENCHMARK NUMERICO .....</b>	<b>95</b>
<b>5.3 BARNs POR FISSAO CALCULADO VERSUS EXPERIMENTAL .....</b>	<b>98</b>

## **APENDICE A - CODIGO CINDER**

<b>A.1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>116</b>
<b>A.2 METODOLOGIA DE CALCULO .....</b>	<b>117</b>
<b>A.3 CADEIAS LINEARES DO CINDER .....</b>	<b>122</b>

## **APENDICE B - CADEIAS LINEARES**

<b>B.1 TECNICA DA CADEIA LINEAR .....</b>	<b>130</b>
<b>B.2 EQUAÇÃO DE BATEMAN .....</b>	<b>134</b>

## **APENDICE C - CODIGO HAMMER-TECHNION**

<b>C.1 INTRODUÇÃO .....</b>	<b>135</b>
<b>C.2 BIBLIOTECA DO HAMMER-TECHNION .....</b>	<b>143</b>

<b><u>REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS .....</u></b>	<b>145</b>
--	------------

## CAPITULO 1

1.1 Introdução

1.2 Histórico

1.3 Pseudo Produto de Fissão

1.4 Objetivo e Divisão do Trabalho

## **1.1 Introdução**

Os produtos de fissão têm sido objeto de estudo em vários ramos da ciência básica e aplicada, desde a descoberta da fissão.

Na física nuclear básica os produtos de fissão têm sido úteis para compreensão dos modelos nucleares e para a formulação e verificação das teorias nucleares, através da observação de certos fenômenos tais como: decaimento alfa, beta, gama. Devido a certas propriedades como a instabilidade nuclear, chegou-se ao entendimento de certos fenômenos associados ao núcleo do átomo e à sua constituição.

Com o advento dos reatores nucleares pôde-se conhecer uma grande quantidade e variedade de produtos de fissão, que posteriormente encontraram várias aplicações dentro da atividade humana.

Na medicina, certos produtos de fissão tem sido utilizados para compreensão do mecanismo de interação de processos bio-químicos e físicos através de traçadores radioativos, radiografia e radioterapia.

Na agricultura, os produtos de fissão são utilizados para explicar e experimentar processos de interação biológico, físico e químico que ocorrem nas plantas, relacionando o estudo da interação solo-planta-atmosfera.

Na indústria, têm sido utilizados desde como traçadores radioativos até em processos nos quais não possam ser utilizados métodos destrutivos de análise, como na determinação de queima do combustível nuclear /53/.

No ramo da engenharia nuclear os produtos de fissão têm uma importância relevante envolvendo vários aspectos

relacionados às suas propriedades; dentre as de maior importância, destaca-se a radioatividade .

Neste contexto, a presença e a produção destes produtos de fissão ao longo da operação do reator nuclear acarreta a necessidade de projetar-se uma blindagem adequada ao sistema. Ainda a respeito da radioatividade tem-se que a energia liberada pelos produtos de fissão torna necessário prover o núcleo com um sistema de refrigeração adequada ; a energia liberada pode inclusive, fundir o núcleo do reator nuclear.

O conhecimento detalhado do inventário dos produtos de fissão é importante, não só sob o ponto de vista de acidentes nucleares, mas também para fins de estocagem , transporte e reprocessamento do combustível nuclear queimado.

Uma outra propriedade destes produtos é a sua importância sob o ponto de vista neutrônico. Durante a operação de um reator nuclear são produzidos centenas de produtos de fissão, como resultado direto da fissão, ou decaimento radioativo dos produtos de fissão mais as interações com neutrons já presentes, sob o ponto de vista neutrônico, muitos dos produtos de fissão apresentam seções de choque e/ou concentrações razoavelmente significativas que acabam competindo, na absorção da população neutrônica com o combustível.

Este efeito, devido à captura de neutrons pelos produtos de fissão, é geralmente denominado de envenenamento devido aos produtos de fissão. Este envenenamento causado por estes produtos de fissão ao longo da operação de um reator nuclear acarreta numa perda de reatividade do sistema e mudança na distribuição de potência associada à queima , de tal forma que torna-se necessária uma intervenção externa através da movimentação de barras de controle, a fim de garantir a criticalidade do sistema.

Além disso, a presença destes produtos de fissão influencia o ciclo do combustível nuclear , que deve ser

considerado no estudo do gerenciamento do combustível nuclear, a fim de garantir a viabilidade econômica do uso da energia nuclear para fins de produção de energia elétrica.

O envenenamento devido aos produtos de fissão tem sido objeto de estudo por vários autores desde a década de 50 /16,73,86/, com a primeira geração de reatores de potência até os dias atuais com a geração de reatores rápidos /6,59,67/.

## 1.2 Histórico

Na seção anterior foram apresentados aspectos gerais dos produtos de fissão envolvendo suas aplicações e estudos correlacionados nas diversas áreas do conhecimento.

Nesta seção, será apresentado um breve histórico do desenvolvimento do tratamento e análise da influência dos produtos de fissão que são produzidos ao longo da operação do reator. O tratamento adequado destes produtos de fissão leva a necessidade de se conhecer o inventário dos produtos de fissão, a partir daí foram desenvolvidos vários códigos afim de resolver as equações de transmutação.

Paralelamente ao desenvolvimento dos códigos que têm por objetivo quantificar a presença dos produtos de fissão durante a queima do combustível, torna-se necessária a compilação adequada e precisa dos dados nucleares referentes aos produtos de fissão, a fim de dar o suporte de dados nucleares ao cálculo do inventário. Devido a necessidade de descrever parâmetro como seção de choque de reação desenvolveram-se teorias a respeito/14,16,34,36/ e experiências que posteriormente, constituíram bibliotecas de dados nucleares para produtos de fissão /44,63,77,79,84/; associado a isto é necessário conhecer o percentual de produção dos produtos de fissão devido á fissão de um dado nuclídeo fissil e fissionável ("yields") /33,50/.

Além destes dados existe uma extensa compilação de dados nucleares a respeito dos produtos de fissão /49/.

Tendo-se quantificado a produção dos produtos de fissão em termos de cálculo através dos códigos de transmutação, deve-se então analisar o efeito destes produtos de fissão ao longo da queima do combustível. Um dos efeitos mais importantes é a absorção parasitária de neutrons. No tratamento da absorção de neutrons pelos produtos de fissão em cálculos de reatores normalmente é feito um tratamento explícito para os nuclídeos  $XE135$  e  $SM149$  que, classicamente, são conhecidos por apresentarem uma grande seção de choque de absorção térmica. Os demais produtos de fissão são tratados sob forma de um pseudo-produto de fissão /38/. Por outro lado, os produtos de fissão têm sido classificados segundo a sua importância quanto à absorção/ 22,60,62,62/.

Os pseudo-produtos de fissão são o resultado de uma análise do comportamento dos produtos de fissão ao longo da queima e representam o comportamento médio destes produtos de fissão agregados.

Para descrever estes pseudo-produtos de fissão constituiram-se vários modelos, um deles é o modelo de Garrison e Roos /38/ que trata os produtos de fissão em três conjuntos distintos, segundo o comportamento destes. O outro modelo conhecido é o modelo de Nephew/82/ que trata um conjunto de nuclídeos segundo a seção de choque; inicialmente trata explicitamente os nuclídeos com seção de choque alta, e com os demais nuclídeos é formado um conjunto de pseudo-produtos de fissão dependente do "yield" de fissão.

Outros modelos/6.11.41.45.62.67,74/ têm sido uma adaptação destes dois, com inclusão de mais nuclídeos tratados explicitamente e melhoria nos dados nucleares referentes aos produtos de fissão. Os modelos de tratamento dos produtos de fissão em forma parcialmente explícita e pseudo-produtos de fissão foram incorporados a códigos de cálculos celulares

/5,41,46/ para reatores térmicos e rápidos, a fim de tratar o problema do cálculo celular com queima .

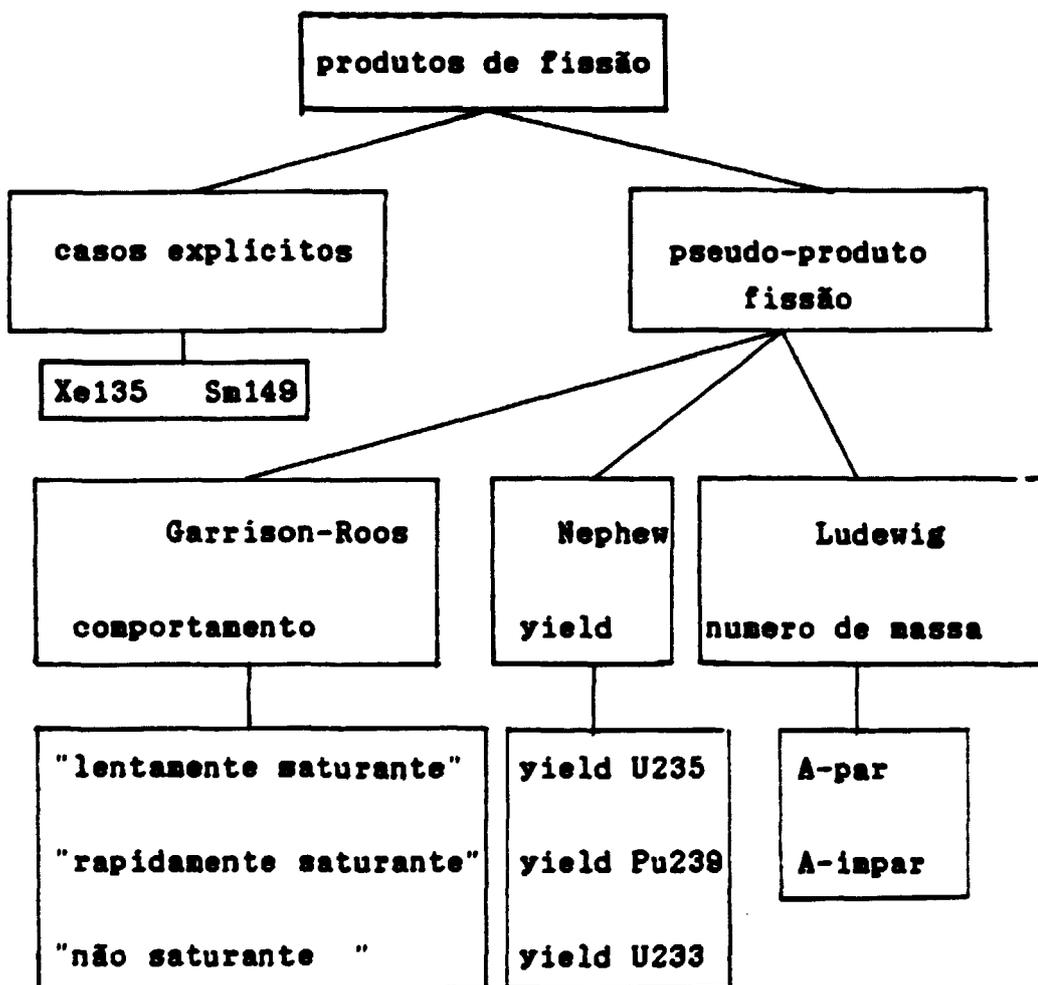
### 1.3 Pseudo Produto de Fissão

Normalmente em cálculos de reatores com queima devem ser considerados os efeitos devido ao aparecimento dos produtos de fissão. No entanto esta consideração era inviável na medida em que se propõe a tratar individualmente todos os produtos de fissão. A inviabilidade reside principalmente do ponto de vista computacional e em termos de dados nucleares.

Desta forma, o tratamento dos produtos de fissão é feito através de um pseudo-produto de fissão ou conjuntos destes pseudo-produtos de fissão. Este nuclídeo fictício denominado pseudo-produto de fissão representa o comportamento médio dos produtos de fissão ao longo da queima. A montagem deste nuclídeo é feita considerando todos os produtos de fissão na qual não será considerado um tratamento explícito como o Xe135 e Sm149, assim produz-se uma seção de choque por grupos de energia convenientemente adaptado para o código que executará o cálculo celular com a queima.

Estes pseudo-produtos de fissão são montados através de determinados critérios como: incluir produtos de fissão com seção de choque pequena, considerar os produtos de fissão com relação ao "yield" de fissão, etc.

O diagrama abaixo ilustra, em linhas gerais o tratamento dos produtos de fissão em forma de pseudo-produtos de fissão com os seus modelos mais conhecidos.



Com relação ao diagrama acima, observa-se que alguns modelos incorporam este esquema para o tratamento dos produtos de fissão no cálculo celular.

Ainda com relação ao diagrama, tem-se que o modelo de Garrison-Roos/38/ é um dos mais conhecidos e os produtos de

fissão são agrupados para formar um conjunto de pseudo-produtos de fissão segundo o comportamento dos produtos de fissão ao longo da queima. Desta forma são montados três conjuntos de pseudo-produtos de fissão ( "rapidamente saturante"; "lentamente saturante" e "não saturante". Outro modelo conhecido é o modelo de Nephew/62/, que inicialmente separa-se os nuclídeos com seções de choque altas tais como( Xe135, Sm149, Sm151, Gd155, Eu155, Cd113 e Gd157) e outro conjunto com seções de choque baixas.

No conjunto dos nuclídeos com seções de choque baixas é montado um pseudo-produto de fissão em função do "yield" de três nuclídeos fisséis ( Pu239, U235, U233).

O modelo de Ludewig /60/ é aplicado a reatores rápidos onde todos os produtos de fissão são tratados segundo o número de massa do nuclídeo, pois este modelo fundamenta-se no fato de que as seções de choque de absorção dos nuclídeos com número de massa ímpar são superiores às seções de choque dos nuclídeos com número de massa par.

Dentre todos os modelos, um procedimento importante e comum a eles é a identificação e a seleção dos produtos de fissão representativos para o reator em questão, segundo a um critério específico. Exemplo disto é o modelo de pseudo-produto de fissão aplicado a reatores rápidos/60/.

Para reatores BWR existe o modelo proposto por Iijima/82/, que consiste em tratar explicitamente 45 nuclídeos através de 13 cadeias e um pseudo-produto de fissão que recentemente foi revisto para o cálculo de um reator HCLWR/81/.

Muitos outros modelos são variações destes descritos acima, entre as variações inclui-se o número maior de nuclídeos tratados explicitamente ou melhoria dos dados nucleares/11/.

Estes modelos constituem a base de cálculo de queima para códigos de cálculo celular.

Com relação à seção de choque destes pseudo-produtos de fissão é definida através de uma soma onde inclui todos os nuclídeos que serão agrupados, isto é, exclui-se os que serão tratados explicitamente, e a seção de choque efetiva é obtida através das seções de choque individuais de todos os nuclídeos ponderados pelos respectivos "yield".

Um outro esquema de montagem de seções de choque para os pseudo-produtos de fissão pode ser visto na referência/74/ , que elabora uma biblioteca de 30 grupos de energia na região térmica e 54 grupos na região epitérmica para um pseudo produto de fissão.

Ilustramos abaixo os nuclídeos normalmente tratados explicitamente através de suas cadeias:

#### NUCLÍDEOS

Sm152, Eu153, Eu154, Eu155, Nd147, Pm147, Pm148, Pm148M, Pm149, Sm149, Gd155, Sm150, Sm151, Sm152, Kr82, Kr83, Rh103, Rh105, Xe131, Nd143, Nd145, Xe133, Cs133, Cs134, Ag109, Nd146, Nd148, Sm147, Pm151, Mo99, Tc 99, Ru100, Ru101, Ru102, Ru103, Pd105, Pd107, Pd108, Pd109, Cd113, I131, Gd154, Gd156, Gd157, Gd158, Zr 93, Ce141, Mo97, Pr143, Cs135

Dentre estes modelos foram feitos muitos testes numéricos de comparação entre os modelos e as bibliotecas de dados utilizados/24/. Mas um grande problema para aferir a consistência do modelo é a carência de dados experimentais que visem a validar estes modelos.

A seguir relacionaremos alguns códigos de cálculo celular que utilizam os modelos de "pseudo-produto" de fissão apresentados anteriormente.

O código APOLLO/46/ é um código de cálculo celular que resolve a equação de transporte de neutrons com tratamento de queima, neste tratamento de queima o código resolve explicitamente 20 produtos de fissão que representam 90% das absorções e os demais são tratados em forma de pseudo-produto de fissão. Este pseudo-produto de fissão são em um conjunto de quatro pseudo-produtos de fissão em termos de "yield" de fissão dos nuclídeos actínidos Pu241, Pu239, U235 e U238.

O código LATREP/41/ resolve o cálculo de queima para 11 nuclídeos actínidos . três produtos de fissão com seções de choque alta e três pseudo-produtos de fissão. Para os três pseudos-produtos de fissão são consideradas seções de choque efetivas de 50, 300, 800 barns segundo a referência/83/.

Quanto aos produtos de fissão com seções de choque altas são considerados os seguinte nuclídeos explicitamente: Xe135, Rh105 e o nuclídeo denominado de " Samário". Este inclui os seguintes nuclídeos: Cd113, Sm149, Sm151, Eu155 e Gd157.

O código WIMS /5/ resolve o cálculo da queima considerando 34 produtos de fissão explicitamente e o pseudo produto de fissão é montado segundo o esquema do Nephew no qual as fissões do nuclídeo U238, U235 produzem um conjunto de 4 pseudo-produtos de fissão e um outro conjunto para as fissões do Pu239 e Pu241.

Os nuclídeos considerados explicitamente são: Kr83, Mo95, Tc99, Ru101, Ru103, Rh103, Rh105, Pd105, Pd108, Ag109, Cd113, In115, I127, Xe131, Cs133, Cs134, I135, Xe135, Cs135, Nd143, Nd145, Pm147, Sm147, Pm148M, Pm148, Pm149, Sm149, Sm150, Sm151, Sm152, Eu153, Eu154, Eu154, Eu155, Gd157.

No código EPRI-CELL /3/ , o módulo que é responsável pelo cálculo da queima consiste no código CINDER-2 que contém 90 cadeias lineares, das quais 21 cadeias são para os nuclídeos actínideos e os demais para os produtos de fissão.

Finalmente em termos de código HAMMER/13/ temos duas versões para considerar a queima . A primeira versão /42/ consiste no acoplamento do código Origen-2 /15/ ao código HAMMER, mas o sistema transfere as seções de choque apenas para os nuclídeos actínideos isto é o código HAMMER transfere as seções de choque de fissão e captura a quatro grupos de energia para o código ORIGEN-2, estas seções de choque são colapsadas para um grupo de energia e são incorporada a biblioteca básica do ORIGEN-2.

Este por sua vez calcula as concentrações para um dado intervalo de tempo e transfere-as ao código HAMMER via o módulo HAMOR-2, mas para os produtos de fissão não existe esta transferência de seção de choque contudo existe a transferência das novas concentrações dos produtos de fissão do ORIGEN-2 para o código HAMMER. Os produtos de fissão considerados no cálculo das concentrações são o Xe135, Sm149 e demais concentrações é obtida considerando se a soma dos demais excluindo o Xe135 e o Sm149.

A segunda versão do HAMMER-TECHNION disponível com o módulo de queima é a HAMMER-TECHNION/CITHAM /1/ que possui uma rotina para o cálculo de queima onde são tratados os actínideos , Xe135, Sm149 e um pseudo-produto de fissão.

Os códigos acima citados que utilizam vários modelos de pseudo-produtos de fissão para considerar o efeito do aparecimento dos produtos de fissão ao longo da queima, apresentam resultados variáveis e em concordância razoável para o mesmo problema, diferindo um pouco nos resultados . A priori

não pode se estabelecer qual é o melhor método para um dado cálculo, pois vários destes códigos utilizam bibliotecas e métodos diferentes para o cálculo celular.

Para verificar a consistência destes modelos é necessário verificar o efeito isolado dos produtos de fissão em termos de absorção de forma experimental para comparar com os modelos. No entanto existem poucos experimentos que tenham esta finalidade, sendo difícil esta comparação.

Observando alguns destes códigos com seus respectivos tratamentos dos produtos de fissão, podemos concluir que a aplicabilidade destes pseudo-produtos de fissão é restrita apenas a uma classe de problemas pois as seções de choque destes conjuntos de pseudo-produtos de fissão são constantes ao longo da queima .

Nos capítulos seguinte será apresentada a estratégia utilizada para considerar os produtos de fissão no cálculo celular através do estudo das cadeias de transmutação e da absorções dos neutrons devido aos produtos de fissão.

Desta forma, objetiva-se a não particularizar o tratamento destes produtos de fissão em forma de pseudo-produtos de fissão. Para tal, os produtos de fissão classificados como os principais absorvedores de neutrons tanto na região térmica quanto na epitérmica serão tratados explicitamente através das cadeias lineares e será gerada uma biblioteca de seções de choque para estes nuclídeos

#### 1.4 Objetivo e Divisão do Trabalho

O trabalho tem por objetivo implementar uma metodologia ao código HAMMER-TECHNION /13/ para considerar o efeito dos

produtos de fissão no cálculo celular dependente da queima do material combustível.

O tratamento dos produtos de fissão e dos actínideos será executado pelo código CINDER-2 /83/, que foi escolhido devido a sua versatilidade e simplicidade.

Desta forma os produtos de fissão serão considerados explicitamente através de cadeias lineares, tornando geral o método de tratamento dos produtos de fissão, pois sabe-se que, em muitos códigos de cálculo celular os produtos de fissão são tratados em forma de pseudo-produtos de fissão ou parcialmente explicitos através de algumas cadeias.

Para analisar e considerar o efeito dos produtos de fissão, o trabalho segue seguintes etapas:

1) Estudo do problema de transmutação em termos de equações de transmutação e cadeias lineares.

2) Análise e classificação dos produtos de fissão em termos de absorção de neutrons.

3) Elaboração de um novo conjunto de cadeias lineares dos produtos de fissão em decorrência dos estudos e análises preliminares.

4) Elaboração de uma biblioteca de seções de choque em forma de multigrupo do código HAMMER-TECHNION para os produtos de fissão, utilizando a biblioteca de dados nucleares básicos ENDF/B-V, processado através do sistema NJOY /81/ e AMPX-II /40/.

5) Mudanças nos códigos CINDER-2 e HAMMER-TECHNION a fim de acoplar estes dois códigos.

6) Validação da metodologia

Para a validação do procedimento serão analisados dois problemas:

a) "benchmark" numérico , onde será comparado o valor de  $K$ -infinito em função da queima e enriquecimento .

b) "benchmark" experimental, onde será comparado o valor de barns/fissão para 2200 m/s para amostras de U233, U235 e Pu239.

O trabalho, basicamente, está dividido em cinco partes principais:

## **CAPITULO 2 Teoria**

Abordagem do problema e equacionamento do problema de transmutação.

## **CAPITULO 3 Absorção de neutrons pelos Produtos de Fissão**

Estudo e classificação dos produtos de fissão quanto à absorção de neutrons para um reator térmico típico PWR.

## **CAPITULO 4 Implementação do cálculo de queima no código HAMMER-TECHNION**

Apresenta as mudanças efetuadas no código HAMMER-TECHNION para implementar o cálculo de queima com o código CINDER-2 e a elaboração das bibliotecas necessárias.

## **CAPITULO 5 Validação da Metodologia**

Cálculo de "benchmark" numérico e "barns/fissão"

## CAPITULO 2

### **2.1 Teoria de Transmutação Nuclear**

### **2.2 Sistema de Equação de Transmutação e Equação de Transporte de Neutrons**

### **2.3 Análise das Cadeias de Transmutação**

## 2.1 Teoria de Transmutação Nuclear

Ao longo do tempo de operação de um reator nuclear são introduzidas mudanças na composição isotópica dos materiais combustíveis devido à exposição a um fluxo de neutrons dentro do núcleo do reator.

Sob vários aspectos é fundamental o conhecimento dessas mudanças introduzidas, pois desta forma é possível prever o comportamento e a dinâmica do reator. Dentre as mudanças introduzidas o conhecimento da produção dos produtos de fissão é extremamente importante.

A produção de produtos de fissão e os nuclídeos actínídeos durante a queima do combustível nuclear são analisados sob o ponto de vista da transmutação nuclear para descrever as mudanças ao longo do tempo na composição do combustível.

Na análise da transmutação nuclear é feito o equacionamento matemático do processo físico, representando a produção e a destruição dos produtos de fissão através do processo de fissão e outras reações nucleares (decaimento radioativo, reação de captura, etc).

Para descrever o processo de transmutação nuclear tomemos, esquematicamente, um dado nuclídeo Ni com número atômico Z e número de massa A:

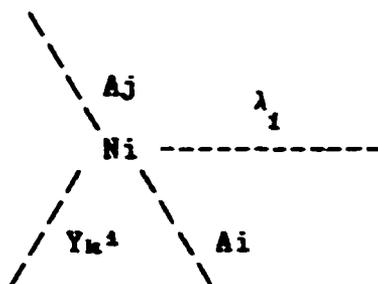


Figura 2.1 : Ilustração esquemática do processo de formação e destruição de um nuclídeo Ni.

O nuclídeo Ni pode ser formado via fissão ( $Y_k^1$ ); a taxa de formação é função do termo "yield", que representa o percentual de produção do nuclídeo Ni devido a fissão do nuclídeo fissil k (ex: U235, Pu239, U233) numa dada energia. Este termo é um dos fatores importantes para análise da transmutação, pois envolve a formação direta deste nuclídeo devido à fissão, este termo caracteriza a distribuição dos produtos de fissão no processo de fissão e é função da energia do nêutron incidente na reação de fissão, do nuclídeo fissil ou fissionável em questão/10/. Os termos Aj, Ai e respectivamente, representam a formação do nuclídeo Ni devido à reação de captura de nêutron por um nuclídeo Nj de mesmo número atômico e com número de massa A-1, ou o decaimento radioativo, o termo Ai, analogamente, é o processo com que se representa a destruição do nuclídeo Ni e o termo  $\lambda_1$  é o decaimento radioativo para um outro nuclídeo.

Para uma situação mais geral, existem centenas de nuclídeos que devem ser representados através de cadeias interligadas que representam as sucessivas transformações, como ilustrado na figura abaixo.

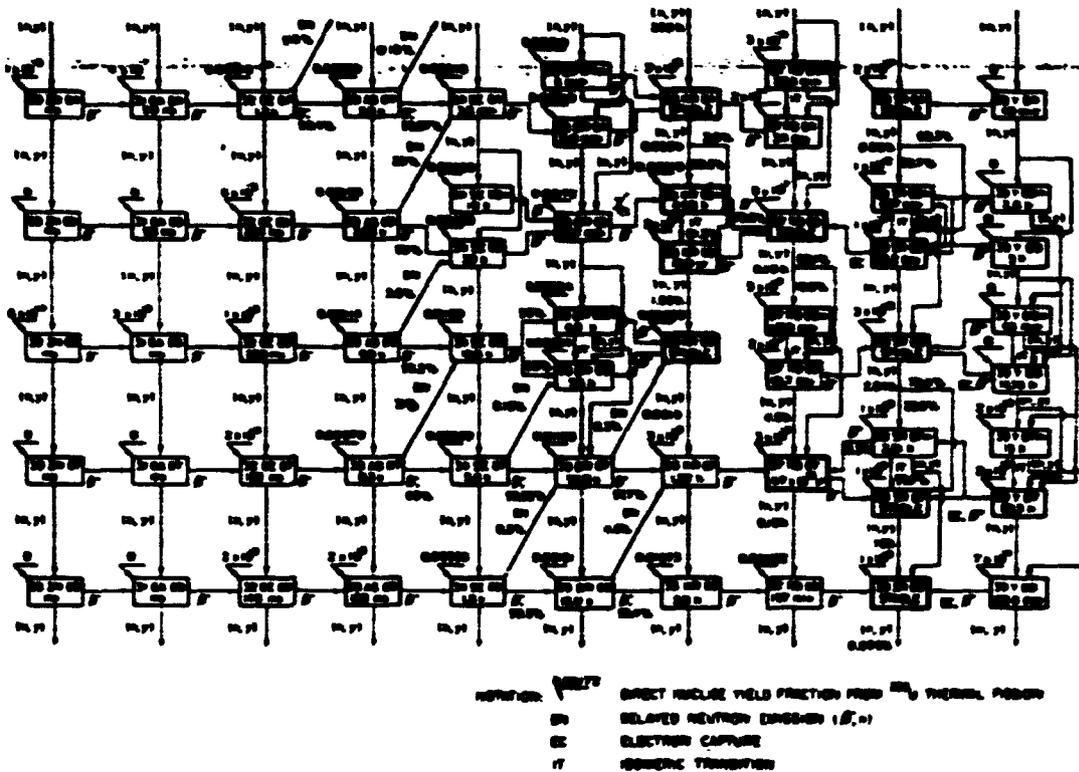


Figura 2.2 : Representação de uma estrutura de cadeia geral.

Normalmente, dependendo da aplicação, não é necessário tomar o problema com tantos detalhes, a análise da transmutação com ênfase à queima do combustível envolve intervalos de tempo relativamente longos, de forma que muitos produtos de fissão estarão em equilíbrio.

Para a análise dos produtos de fissão em termos de absorção e produção, este problema se reduz bastante através do tratamento de cadeias lineares. (ver Apêndice-B Técnica das Cadeias Lineares)

Tomando uma situação geral para uma cadeia linear, que consiste em representar uma cadeia complexa de forma que o acoplamento seja apenas em um sentido, a fim de equacionar o problema temos;

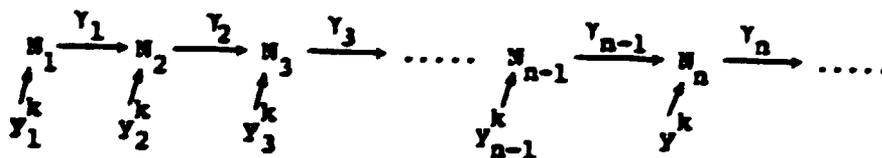


Figura 2.3 Ilustração de Cadeia Linear.

A equação básica que rege o problema de transmutação/19/ é o balanço da taxa de destruição e a taxa de formação, desta forma , a taxa de variação temporal de um dado nuclide na cadeia pode ser escrito como sendo:

$$\frac{dN}{dt} = P - D \quad (2.1.1)$$

onde:

N= Densidade ou concentração de um dado nuclide

P= modos de produção( decaimento, fissão, reação de captura)

D= modos de destruição (decaimento, reação de captura)

Equacionando a cadeia acima de uma forma mais representativa temos:

$$\frac{dN_1}{dt} = y_1 s - \lambda_1 N_1 - A_1 N_1 \quad (2.1.2)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = y_2 s + \gamma_1 N_1 - \lambda_2 N_2 - A_2 N_2 \quad (2.1.3)$$

.

.

.

$$\frac{dN_n}{dt} = y_n s + \gamma_{n-1} N_{n-1} - \lambda_n N_n - A_n N_n \quad (2.1.4)$$

onde  $y_1^k$  = "yield" devido ao nuclide fissil k

s= taxa de fissão

$A_1$ = taxa de destruição via absorção por nuclide

$\lambda_1$  = constante de decaimento radioativo por nuclide

$\gamma_{n-1}$  pode ser  $\lambda_{n-1}$  ou  $\Lambda_{n-1}$  dependendo do tipo de acoplamento com o precursor  $i-1$

Uma das vantagens da técnica das cadeias lineares está exatamente no equacionamento que se torna bastante simples devido à estrutura linear da cadeia, como se observa nas equações acima.

O conjunto de equações (2.1.2 - 2.1.4) descritas acima descreve o comportamento dos nuclídeos nas estas equações na verdade, são acopladas a uma outra equação que é a equação de transporte de neutrons. Este acoplamento é necessário pois a concentração dos produtos de fissão descrita pelas equações acima depende do fluxo de neutrons, pois existem termos como a taxa de fissão e termos de captura de neutrons que são funções do campo de neutrons. Além disso, o fluxo de neutrons dependem das concentrações dadas pelas equações de transmutação, portanto, temos um sistema de equações acopladas não linearmente.

Escrevendo a equação de transmutação de maneira a evidenciar a dependência do fluxo de neutrons temos:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt}(\underline{r}, t) &= \sum_k y_i^k S_k(\underline{r}, t) + \sum_j \gamma_j^i(\underline{r}, t) N_j(\underline{r}, t) - \lambda_i N_i(\underline{r}, t) \\ &- N_i(\underline{r}, t) \int_{\Omega} d\Omega \int_E dE \sigma_{ai}(E) \phi(\underline{r}, \Omega, E, t), \end{aligned}$$

$$i = 1, 2, \dots, N \quad (2.1.5)$$

onde:

$y_k^i(E)$  = "yield" de fissão do nuclídeo  $i$  devido ao nuclídeo fissil  $k$  para energia  $E$ .

$$Y_i^k S_k(\underline{r}, t) = N_k(\underline{r}, t) \int \frac{d\Omega}{4\pi} \int \frac{dE}{E} Y_i^k(E) \sigma_{fk}(E) \phi(\underline{r}, \Omega, E, t) ,$$

$\sigma_{fk}(E)$  = seção de choque microscópica de fissão do nuclídeo k

$\sigma_{ai}(E)$  = seção de choque microscópica de absorção do nuclídeo i

$\gamma_j^i(\underline{r}, t)$  = fator de acoplamento

$\phi(\underline{r}, \Omega, E, t)$  = fluxo de neutrons

A equação que descreve o fluxo de neutrons é obtida através de um balanço de neutrons num volume de controle/V/ descrita abaixo:

$$\begin{aligned} \frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\underline{r}, \Omega, E, t) + \Omega \nabla \phi(\underline{r}, \Omega, E, t) + N(\underline{r}, t) \cdot \sigma_a(E) \phi(\underline{r}, \Omega, E, t) = \\ \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \int \frac{dE'}{E} N(\underline{r}, t) \cdot \sigma_f(\underline{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) \phi(\underline{r}, \Omega', E', t) + \\ + \frac{\chi(E)}{4\pi} \int \frac{d\Omega'}{4\pi} \int \frac{dE'}{E} N(\underline{r}, t) \cdot \nu \sigma_f(E') \phi(\underline{r}, \Omega', E', t) \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

$N(\underline{r}, t)$  = vetor cujos componentes são a densidade de nuclídeos

$\sigma_a(E)$  = vetor cujos componentes são a seção de choque microscópica

...,  $\sigma_f(\underline{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$  = vetor cujos componentes são as seções de choque diferenciais

$\nu \sigma_f(E)$  : vetor produção de neutrons

$$X(E) = (1-\beta)X_p(E) + \sum_i \beta_i X_{D_i}(E)$$

$X_p(E)$  = espectro dos neutrons prontos de fissão

$X_{D_i}(E)$  = espectro de neutrons atrasados do precursor  $i$

$\beta_i$  = fração de produção de neutrons atrasados

$\beta$  = fração total de produção de todos os precursores por neutrons de fissão.

Desde que o propósito da análise do processo de transmutação para cálculo em reatores envolve períodos longos de tempo, uma vez que os precursores de neutrons atrasados estão em equilíbrio, estes serão desprezados na análise.

## 2.2 Sistema de Equações de Transmutação e Equação de Transporte de Neutrons

As equações (2.1.5) e (2.1.6) descrevem a evolução temporal da concentração dos produtos de fissão, nuclídeos actinídeos e o fluxo de neutrons, além disto constituem um conjunto de equações não lineares acopladas, pois, para determinar as concentrações dos nuclídeos é necessário conhecer o fluxo de neutrons e, por outro lado, para determinar o fluxo de neutrons, é necessário conhecer as concentrações dos nuclídeos.

Para solucionar as equações (2.1.5) e (2.1.6) utiliza-se o método da aproximação "quasi-estática"/70/, que consiste em dividir o tempo de operação do reator em intervalos de tempo

,tal que estes intervalos utilizados nesta discretização descrevam o comportamento do reator durante a operação. No início do intervalo de tempo resolve-se a equação de transporte de neutrons determinando-se os fluxos, estes são mantidos constantes no decorrer do intervalo de tempo para o cálculo da transmutação, desta forma são calculadas as novas concentrações para o próximo intervalo, com as novas concentrações determina-se o fluxo no início do próximo intervalo de tempo que por sua vez será utilizado no cálculo das novas concentrações, seguindo sucessivamente através dos intervalos de tempo discretizado.

Para utilizar este procedimento além das equações (2.1.5) e (2.1.6), normalmente, o sistema de um reator nuclear está restrito a determinados vínculos como a densidade máxima de potência e criticalidade do sistema e potência de operação.

Desta forma a potência pode ser expressa como sendo:

$$P(t) = \int_V d^3r \int_{\Omega} d\Omega \int_E dE \sum_k G_k N_k(r,t) \phi(r,\Omega,E,t) \sigma_{fk}(E) \quad (2.2.1)$$

onde:

$G_k$  = é a energia liberada por fissão de um nuclídeo fissil ou fissionável  $k$

$V$  = volume do reator

O vínculo de criticalidade é imposto de maneira que a equação de transporte de neutrons estacionária tenha uma solução não trivial. Desta forma, o fluxo de neutrons independe explicitamente do tempo, então a equação de transporte de neutrons pode ser escrita como sendo:

$$\begin{aligned}
& \partial \cdot \nabla \phi(\underline{r}, \underline{q}, E, t) + \underline{N}(\underline{r}, t) \cdot \underline{v} \varphi_{\underline{r}}(E) \phi(\underline{r}, \underline{q}, E, t) = \\
& \int d\underline{q}' \int dE' \underline{N}(\underline{r}, t) \cdot \underline{v} \varphi_{\underline{r}}(\underline{r}, \underline{q}', E' \rightarrow \underline{q}, E) \phi(\underline{r}, \underline{q}', E', t) + \\
& \frac{\chi(E)}{4\pi} \int d\underline{q}' \int dE' \underline{N}(\underline{r}, t) \cdot \underline{v} \varphi_{\underline{r}}(E) \phi(\underline{r}, \underline{q}', E, t) \quad (2.2.2)
\end{aligned}$$

Tomando uma notação reduzida:

$$B(\underline{N}(\underline{r}, t), \underline{C}(\underline{r}, t)) \phi(\underline{r}, \underline{q}, E, t) = 0 \quad (2.2.3)$$

onde o vetor  $\underline{C}(\underline{r}, t)$  incorpora as variáveis de controle do reator,  $B$  é o operador de Boltzmann.

O processo "quasi-estático" consiste /70/, inicialmente, em escrever o fluxo de maneira apropriada, isto é, o fluxo é o produto do fator de amplitude na qual se expressa apenas uma dependência temporal, e um fator de forma, tal que:

$$\phi(\underline{r}, \underline{q}, E, t) = \theta(t) \psi(\underline{r}, \underline{q}, E, t) \quad (2.2.4)$$

A magnitude do fator de forma, a principio é arbitrária, então pode ser escolhida de maneira que seja normalizada, isto é:

$$\int d^3\underline{r} \int d\underline{q} \int dE \psi(\underline{r}, \underline{q}, E, t) = 1 \quad (2.2.5)$$

Escrevendo as equações (2.2.3), (2.2.1), (2.1.5) em termos da equação (2.2.4) temos:

$$B(\underline{N}(\underline{r}, t), \underline{C}(\underline{r}, t)) \psi(\underline{r}, \underline{q}, E, t) = 0 \quad (2.2.6)$$

$$\frac{dN_i}{dt}(\underline{r}, t) = \theta(t) \sum_k \Gamma_k N_k(\underline{r}, t) \int_E dE y_i^k(E) \sigma_{fk}(E) \psi(\underline{r}, E, t) +$$

$$+ \sum_j \gamma_j^i(\underline{r}, t) N_j(\underline{r}, t) - \beta_i(\underline{r}, t) N_i(\underline{r}, t)$$

$$i = 1, \dots, N \quad (2.2.7)$$

$$\theta(t) = \frac{P(t)}{\int_V d^3\underline{r} \int_E dE \int_Q dQ \sum_k \Gamma_k N_k(\underline{r}, t) \sigma_{fk}(E) \psi(\underline{r}, Q, E, t)} \quad (2.2.8)$$

onde  $\beta_i(\underline{r}, t) = \lambda_i + \theta(t) \int_E dE \sigma_{ai}(E) \psi(\underline{r}, E, t),$

•  $\psi(\underline{r}, E, t) = \int_Q dQ \Psi(\underline{r}, Q, E, t)$

A aproximação "quasi-estática" é, basicamente, o processo de linearização dos conjuntos de equações acima (2.2.6, 2.2.7 e 2.2.8). Desta forma, na aproximação quasi-estática é possível resolver os conjuntos de equações acopladas, para tal toma-se, inicialmente, uma discretização no tempo útil da operação de um reator em intervalos de tempos. Estes intervalos de tempo são tomados de tal forma que leve em consideração determinados comportamentos como o equilíbrio do Xenônio e do Samário/39,56/. Usualmente, escolhe-se o primeiro intervalo de tempo de forma a considerar o equilíbrio do Xenônio, e os demais intervalos de tempo são tomados segundo o equilíbrio do nuclideo Samário.

Após a discretização, procede-se ao cálculo do fluxos de neutrons no inicio deste intervalo de tempo, obtido o fluxo, este é mantido constante durante o intervalo de tempo na resolução das equações de transmutação que fornecerão as novas

concentrações dos nuclídeos para o início do próximo intervalo de tempo.

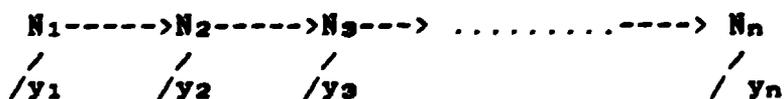
Este cálculo é executado sucessivamente até o número de intervalos de tempo tomados no problema.

### 2,3 Análise da Cadeia de Transmutação

Nesta seção, será feita uma análise qualitativa e quantitativa do comportamento dos nuclídeos em um sistema de transformações sucessivas, observando o comportamento em termos das variáveis envolvidas na equação de transmutação.

Para fazer uma apresentação de uma forma didática e discutindo as variáveis envolvidas na equação de transmutação, será apresentada uma cadeia hipotética inicialmente, onde desenvolver-se-á o equacionamento matemático e após a análise através dos parâmetros envolvidos na equação, apresentar-se-á um exemplo numérico correspondente através de uma cadeia linear da biblioteca do código CINDER-2 com os seus respectivos dados numéricos para exemplificar, de uma forma prática, os resultados obtidos através das equações.

Desta forma tomemos a seguinte cadeia hipotética :



Equacionando inicialmente o nuclídeo  $N_1$  temos:

$$\frac{dN_1}{dt} = \lambda_1 N_1 - \beta_1 N_1 \quad (2.3.1)$$

onde  $y_1 =$  "yield" de fissão para a produção de  $N_1$

$$y_1 s = \sum_k y_k \Sigma_k \phi$$

$$\beta_1 = \lambda_1 + \Lambda_1 = \lambda_1 + \sigma_a \phi = \text{modos de destruição por nuclídeo } i$$

Nesta análise será considerado o termo "yield" de apenas um único nuclídeo fissionável por simplicidade .

Desta forma tomando  $y_s$  e o fluxo constante no intervalo de tempo considerado na resolução da equação(2.3.1) temos que a solução da mesma será :

$$N_1(t) = N_1(t_0) \cdot \exp(-\beta_1 t) + (y_1 s / \beta_1) (1 - \exp(-\beta_1 t))$$

A fim de simplificar, consideremos que no início do tempo ,  $t=t_0$ , a concentração de  $N_1(t)$  seja nula então:

$$N_1(t) = (y_1 s / \beta_1) (1 - \exp(-\beta_1 t)) \quad (2.3.2)$$

Neste caso devemos considerar a análise no termo do argumento da exponencial da equação acima, inicialmente, existem dois casos a serem considerados:

a)  $\beta_1 \Delta t \gg 1$

b)  $\beta_1 \Delta t \ll 1$

Para o item a) temos:

$$\beta_1 \Delta t \gg 1 \quad \exp(-\beta_1 t) \approx 0 \quad 0$$

A concentração para  $N_1$  fica sendo :

$$N_1(t) = y_1 s / \beta_1 \quad (2.3.3)$$

Normalmente, este caso é classificado como sendo um nuclídeo saturante, pois em princípio  $N_1(t)$  não depende

explicitamente do tempo, análogo ao caso em que o nuclídeo está em equilíbrio. Numa situação geral, a concentração de  $N_1(t)$  depende de outras variáveis tais como o termo de produção.

De forma genérica a taxa de fissão pode ser escrita como sendo:

$$R = \sum \sigma_f^k N^k \phi \quad (2.3.4)$$

onde a somatória é feita sobre todos os nuclídeos fisséis e fissionáveis.

Além disso, o termo "yield" ( $y_1$ ), apesar de ser uma constante, depende dos nuclídeos fisséis, portanto é necessário considerar a contribuição de todos os nuclídeos fisséis e fissionáveis envolvidos no problema.

Para o denominador da expressão (2.3.3) tem-se que:

$$\beta_1 = \lambda_1 + A_1 = \lambda_1 + \sigma_a \phi = \quad (2.3.5)$$

Portanto a expressão (2.3.3) é resultado do comportamento dado pelas equações (2.3.4) e (2.3.5).

Analisando a equação (2.3.5) temos: se o nuclídeo  $N_1$  apresenta apenas o decaimento radioativo, ou seja, a captura de neutrons é desprezível em relação ao decaimento ( $\lambda_1 \gg \sigma_a \phi$ ), como o valor da constante de decaimento é característico do nuclídeo e é uma constante, o comportamento do nuclídeo  $N_1$  será igual a curva da taxa de fissão versus o tempo multiplicado pelo fator ( $y_1 / \lambda_1$ ). Na técnica de cadeias lineares (ver Apêndice.B) considera-se apenas um processo físico de acoplamento dentro da cadeia, desta forma um nuclídeo que sofre decaimento radioativo é representado numa cadeia, enquanto o processo de destruição deste mesmo nuclídeo, através da captura de neutrons, é descrito por outra cadeia.

Considerando o caso em que o decaimento radioativo é predominante sobre o processo de absorção, podemos observar que

o acoplamento via absorção, dependendo da magnitude ( seção de choque, fluxo de neutrons) é desprezível comparado com a fonte via fissão e taxa de destruição deste nuclideo, portanto o comportamento do nuclideo que se encontra acoplado com  $N_1$  via absorção não depende do comportamento do seu precursor ( $N_1$ ). A análise inversa isto é,  $\lambda_1 \ll \sigma_a \phi$ , também são válidas as observações tomadas acima, portanto é possível elaborar uma cadeia através das informações a respeito da forma de acoplamento existente entre os nuclideos.

Nos parágrafos acima observamos o comportamento para os dois casos:  $\lambda_1 \gg \sigma_a \phi$  e  $\lambda_1 \ll \sigma_a \phi$ , mas resta o caso em que tanto absorção quanto ao decaimento tem a mesma magnitude. Neste caso, torna-se necessário considerar os dois efeitos. Outro parâmetro importante é o "yield" de fissão do nuclideo, pois esta grandeza representa a produção deste nuclideo via fissão dos nuclideos físseis e fissionáveis, desta forma é necessário considerar o efeito global desta contribuição. O processo de formação via fissão está associado à quantidade dos nuclideos físseis e fissionáveis existentes desde o início até o final da vida útil do combustível. Com relação a um reator típico PWR, ocorrem o consumo do nuclideo actínideo U235 e a formação do nuclideo actínideo Pu239 via U238, conseqüentemente num dado tempo da queima a contribuição devido ao nuclideo actínideo Pu239 é significativa. Neste contexto existem produtos de fissão que têm um "yield" maior devido a fissão de um nuclideo actínideo (ex:U235) do que o outro nuclideo actínideo (ex:Pu239), também existindo o caso inverso. Esta análise será considerada no capítulo seguinte onde se fará um estudo referente a contribuição deste termo considerando o efeito isolado do termo "yield" de um dado nuclideo físsil.

Das observações acima não se pode concluir que podemos eliminar este ou aquele nuclideo da cadeia, mas serve para entender o acoplamento e escolher a melhor forma de tratar as cadeias considerando as grandezas envolvidas.

Exemplificando o caso em que  $\beta_1 \Delta t \gg 1$  temos a seguinte cadeia da biblioteca do código CINDER-2:

Ba141->La141->Ce141->Pr141->Pr142->Nd142->Nd143

O acoplamento entre o nuclídeo Ba141 e La141 se verifica através de decaimento radioativo. Tomando os valores numéricos referentes ao nuclídeo Ba141 da biblioteca do código CINDER-2 temos:

NUCLÍDEO	Ba141
Constante de Decaimento	6.31281E-04 (1/s)
Yield devido à fissão térmica do U235	5.77663E-02
Yield devido à fissão térmica do Pu239	5.15630E-02
Intervalo de Tempo	960 Hrs

Observando o valor numérico da constante de decaimento e o intervalo de tempo temos que o valor de  $\beta_1 \Delta t \gg 1$  portanto o nuclídeo Ba141 tem o comportamento saturante dado pela equação (2.3.3)

Para o item b) temos:

$$\beta_1 \Delta t \ll 1 \longrightarrow \exp(-\beta_1 \Delta t) \approx 1 - \beta_1 \Delta t$$

Então a equação (2.1.6) será representada por :

$$N_1(t) = y_1 \lambda t \quad (2.3.6)$$

O comportamento apresentado para este caso normalmente é classificado como sendo "linear" ou "não saturante". Observa-

se na equação (2.3.6) a dependência explícita do tempo na concentração do nuclídeo  $N_1(t)$ .

Considerando as observações anteriores do item a), o comportamento para  $N_1(t)$  é dependente da função do termo taxa de fissão. Neste caso independente de  $\lambda_1 \ll \sigma_a \phi$  ou  $\lambda_1 \gg \sigma_a \phi$

Observa-se que o acoplamento fornecido aos nuclídeos que sucedem a este na cadeia linear será fraco.

Para este caso tomemos a seguinte cadeia:

Mo98  $\rightarrow$  Mo99  $\rightarrow$  Tc99  $\rightarrow$  Ru100  $\rightarrow$  Ru101

O acoplamento entre o nuclídeo Mo98 e Mo99 verifica-se através da absorção de neutrons, ou seja, reação de captura, desta forma tomando as seções de choque microscópicas de absorção colapsadas para quatro grupos de energia do nuclídeo Mo98 da biblioteca do código CINDER-2, temos:

NUCLÍDEO	Mo98
seção de choque de absorção do grupo 1 (barns)	1.485810E-02
seção de choque de absorção do grupo 2 (barns)	7.750510E-02
seção de choque de absorção do grupo 3 (barns)	7.715920E-01
seção de choque de absorção do grupo 4 (barns)	1.283420E-01
Yield devido à fissão térmica do U235	5.774400E-02
Yield devido à fissão térmica do Pu239	5.831550E-02

Observando os valores das seções de choque e o intervalo de tempo, o nuclídeo No98 tem o comportamento linear segundo a equação (2.3.6)

Nestes dois exemplos apresentados  $\beta_1 \Delta t \gg 1$  e

$\beta_1 \Delta t \ll 1$ , observa-se que o nuclídeo Ba141 fornece um acoplamento forte via decaimento enquanto que o nuclídeo No98 fornece um acoplamento fraco através da reação de captura e os valores numéricos dos "yields" para os dois casos são da mesma ordem de grandeza. É importante observar o fato de que os valores do "yields" são da mesma ordem de grandeza pois apesar do nuclídeo No98 ter uma seção de choque de reação de captura baixa, não é desprezível pelo fato de ter um comportamento linear e como já mencionado ter um "yield" considerável. Por outro lado, o nuclídeo, como Ba141 que tem um acoplamento forte com o seu sucessor e se este sucessor tem seção de choque de absorção significativa, torna-se importante considerar este acoplamento.

Tomando a análise para o segundo nuclídeo da cadeia ( $N_2$ ) temos:

$$\frac{dN_2}{dt} = \gamma_2 + \beta_1 N_1 - \beta_2 N_2 \quad (2.3.7)$$

A solução da equação será:

$$N_2(t) = (\gamma_2 / \beta_2) (1 - \exp(-\beta_2 t)) + \exp(\beta_1 t) \int N_1(t) \exp(\beta_1 t) dt \quad (2.3.8)$$

Na equação acima verifica-se a dependência do nuclídeo  $N_1(t)$  e como na análise anterior, temos os seguintes casos a serem considerados:

- c)  $\beta_1 \Delta t \gg 1$  e  $\beta_2 \Delta t \gg 1$
- d)  $\beta_1 \Delta t \gg 1$  e  $\beta_2 \Delta t \ll 1$
- e)  $\beta_1 \Delta t \ll 1$  e  $\beta_2 \Delta t \gg 1$
- f)  $\beta_1 \Delta t \ll 1$  e  $\beta_2 \Delta t \ll 1$

Inicialmente para o caso c):

$\beta_1 \Delta t \gg 1$  e  $\beta_2 \Delta t \gg 1$  temos:

a concentração de  $N_1(t)$  é dada como sendo:

$$N_1(t) = y_1 e^{-\beta_1 t}$$

como  $\beta_1 \Delta t \gg 1$   $\exp(-\beta_1 t) \approx 0$

tem-se:

$$N_2(t) = (y_1 + y_2) e^{-\beta_2 t} \quad (2.3.9)$$

Analogamente ao caso a) o nuclídeo pode ser classificado como sendo "saturante", observa-se que o acoplamento do nuclídeo  $N_1(t)$  é dado pelo seu "yield" de fissão, desta forma pode se representar o nuclídeo em equilíbrio com o nuclídeo  $N_1(t)$ . O nuclídeo  $N_2(t)$  pode ser representado por um "yield" fictício tal que seja a soma dos "yields", este esquema é adotado na formulação das cadeias lineares do código CINDER-2, isto é adota-se um "yield" fictício para o nuclídeo que tem seus antecessores com meia vida curta. O mesmo tipo de consideração quanto a forma de acoplamento citado no item a) é válida a neste caso. Desta forma, podemos generalizar o comportamento quando o termo  $\beta_1 \Delta t \gg 1$

Para analisar numericamente o caso  $\beta_1 \Delta t \gg 1$ ;  $\beta_2 \Delta t \gg 1$  retomemos a seguinte cadeia já apresentada anteriormente:

Ba141-→La141-→Ce141-→Pr141-→Pr142-→Nd142-→Nd143

Tomando os dados numéricos referente ao nuclídeo La141 temos:

NUCLÍDEO	La141
Constante de Decaimento	4.899259E-05 (1/s)
Yield devido à fissão térmica do U235	1.844170E-04
Yield devido à fissão térmica do Pu239	1.000522E-03

O nuclídeo La141 enquadra-se no caso  $\beta_1 \Delta t \gg 1$  e  $\beta_2 \Delta t \gg 1$ , pois o nuclídeo antecessor é o Ba141, que já foi apresentado. O acoplamento do nuclídeo La141 com o seu sucessor, Ce141, ocorre via decaimento radioativo e o seu comportamento é classificado como sendo saturante, satisfazendo a equação (2.3.9).

Neste acoplamento do nuclídeo Ba141 e La141 observamos a importância do termo "yield" do nuclídeo antecessor, pois segundo a equação (2.3.9), estas grandezas se somam e especificamente neste problema, os valores do "yield" do nuclídeo Ba141 são superiores aos valores do La141.

Para o caso d):

$$\beta_1 \Delta t \gg 1 \text{ e } \beta_2 \Delta t \ll 1$$

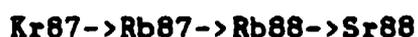
temos que a concentração do nuclídeo  $N_2(t)$  pode ser escrita como sendo:

$$N_2(t) = (y_1 + y_2) e^{-\lambda t} \quad (2.3.10)$$

O nuclídeo  $N_2(t)$  é classificado como linear segundo a equação acima. Além disso neste caso também os termos "yields" dos dois nuclídeos se somam, desta forma é importante o valor numérico destes, pois um nuclídeo mesmo com o valor de "yield" baixo, pode ter o seu predecessor com um valor de "yield" alto, conseqüentemente é atribuído a este o valor do "yield" do seu predecessor.

Neste esquema é possível atribuir um pseudo-yield ao nuclídeo de tal forma que represente corretamente o problema em termos quantitativos. Na cadeia da biblioteca do CINDER-2 este artifício é utilizado para nuclídeos que têm meia vida inferior a quatro horas, isto numa transição que leve de um nuclídeo a outro nuclídeo com meia vida inferior a quatro horas e, depois uma nova transição a um outro nuclídeo que tenha uma meia vida superior a quatro horas, o valor do "yield" do nuclídeo com meia vida inferior a quatro horas é atribuído para o nuclídeo sucessor com meia vida superior a quatro horas.

O exemplo para o caso acima,  $\beta_1 \Delta t \gg 1$  e  $\beta_2 \Delta t \ll 1$ , pode ser demonstrado pela seguinte cadeia:



Tomando os valores numéricos da biblioteca do CINDER-2 temos:

NUCLÍDEO	Kr87
Constante de decaimento	1.514083E-04 (1/s)
Yield devido à fissão térmica do U235	2.517820E-02
Yield devido à fissão térmica do Pu239	3.872430E-02

NUCLIDEO	Rb87
seção de choque de absorção do grupo 1 (barns)	2.10695E-03
seção de choque de absorção do grupo 2 (barns)	1.04549E-02
seção de choque de absorção do grupo 3 (barns)	2.53980E-01
seção de choque de absorção do grupo 4 (barns)	1.20640E-01
Yield devido à fissão térmica do U235	3.95942E-04
Yield devido à fissão térmica do Pu239	5.24970E-05

O nuclídeo Kr87 está acoplado ao nuclídeo Rb87 através do decaimento radioativo, neste acoplamento o valor de  $\beta_1 \Delta t \gg 1$ , desta forma o nuclídeo Kr87 pode ser classificado como sendo saturante como já mencionado anteriormente.

Para o nuclídeo Rb87 tem-se que o valor de  $\beta_2 \Delta t \ll 1$  segundo os valores das seções de choque acima, desta forma seu comportamento é linear e obedece a Equação(2.3.10).

Com relação a Equação(2.3.10), observa-se novamente a importância do termo "yield" do nuclídeo predecessor, Kr87, em termos de contribuição no nuclídeo Rb87, isto é evidente através dos valores numéricos dos "yields" dos dois nuclídeos.

Para o item e) temos:

$$\beta_1 \Delta t \ll 1 \quad e \quad \beta_2 \Delta t \gg 1$$

A equação para descrever o nuclídeo  $N_2(t)$  será:

$$N_2(t) = y_2 e^{-\beta_2 t} + \beta_1 / \beta_2 \sum_{i=1}^n y_i (t + 1/\beta_2) \quad (2.3.11)$$

Desta vez temos que o caso acima pode ser considerado "linear", mas para tanto necessita-se conhecer quantitativamente os valores envolvidos.

O exemplo para este caso,  $\beta_1 \Delta t \ll 1$  e  $\beta_2 \Delta t \gg 1$  pode ser mostrado através da seguinte cadeia:



O nuclídeo Mo88 já foi analisado anteriormente e descrito o seu comportamento.

Tomando os valores para o nuclídeo Mo89 temos:

NUCLÍDEO	Mo89
Constante de Decaimento	2.291786E-06 (1/s)
Yield devido à fissão térmica do U235	8.119110E-02
Yield devido à fissão térmica do Pu239	8.156120E-02

Pelos valores da tabela acima o nuclídeo Mo89 tem o valor de  $\beta_2 \Delta t \gg 1$ , desta forma satisfaz a Equação (2.3.11), nesta equação observa-se a dependência do termo "yield" multiplicando a variável tempo.

Para o item f) temos:

$$\beta_1 \Delta t \ll 1 \quad \bullet \quad \beta_2 \Delta t \ll 1$$

A equação que descreve o comportamento de  $N_2(t)$  pode ser representado como sendo:

$$N_2(t) = y_2 e^{-\lambda_2 t} \quad (2.3.12)$$

A equação acima mostra a dependência direta do termo "yield" com o tempo e não traz informações a respeito do nuclídeo predecessor. Este resultado é devido ao acoplamento fraco oferecido pelo nuclídeo predecessor. Este resultado pode ser utilizado para "quebrar" a cadeia em pontos de acoplamento fraco, com este procedimento pode se iniciar uma nova cadeia a partir deste nuclídeo caso seja necessário.

A cadeia abaixo exemplifica o caso:  $\beta_1 \Delta t \ll 1$  e  $\beta_2 \Delta t \ll 1$ :



Com relação à cadeia acima, observa-se uma particularidade da biblioteca do código CINDER-2 já citada anteriormente.

Na biblioteca do CINDER-2 o acoplamento entre o nuclídeo Mo100 e o nuclídeo Ru101 é descrito como sendo um acoplamento através da reação de captura dos neutrons mas, na realidade o nuclídeo Mo100 sofre uma reação de captura de neutrons transformando-se no nuclídeo Mo101, que por sua vez é instável e decai com uma meia vida de 14.6 minutos para o nuclídeo Ru101.

A omissão do nuclídeo Mo101 é justificada, pois a biblioteca do código CINDER-2 contém apenas nuclídeos com meia vida superior a quatro horas.

Esta omissão ocorre apenas na cadeia, mas as quantidades envolvidas deste nuclídeo são incorporadas ao nuclídeo Ru101, desta forma esta cadeia fica corretamente representada

Tomando os valores numéricos referentes aos dois primeiros nuclídeos desta cadeia temos:

NUCLÍDEO	Mo100
seção de choque de absorção do grupo 1 (barns)	9.68723E-03
seção de choque de absorção do grupo 2 (barns)	6.04586E-02
seção de choque de absorção do grupo 3 (barns)	4.42180E-01
seção de choque de absorção do grupo 4 (barns)	2.00123E-01
Yield devido à fissão térmica do U235	6.20557E-02
Yield devido à fissão térmica do Pu239	6.80954E-02

NUCLIDEO	Ru101
seção de choque de absorção do grupo 1 (barns)	3.88424E-02
seção de choque de absorção do grupo 2 (barns)	5.92171E-01
seção de choque de absorção do grupo 3 (barns)	9.99165E+00
seção de choque de absorção do grupo 4 (barns)	3.13487E+00
Yield devido à fissão térmica do U235	5.07374E-02
Yield devido à fissão térmica do Pu239	5.89887E-02

Este tipo de análise pode se estender para o n-ésimo termo da cadeia, mas tomaremos o estudo até o segundo nuclídeo nesta apresentação, pois os demais seguem de forma geral o esquema mostrado acima.

A apresentação acima fornece bases para a análise da cadeia em termos das variáveis envolvidas no acoplamento e conseqüentemente, servirá de suporte para a elaboração de novas cadeias segundo o interesse do problema.

Dentro dos exemplos apresentados acima, podemos observar resultados de grande interesse para a elaboração de uma cadeia linear tais como:

- a) importância do termo "yield"

b) predominância do acoplamento via decaimento radioativo comparado ao acoplamento via absorção de neutrons. Como consequência desta observação, dependendo da forma de acoplamento, é possível "quebrar" a cadeia como no exemplo da cadeia do Mo100, onde o nuclídeo Ru101 pode ser início de uma cadeia, uma vez que o nuclídeo Mo100 encontra-se fracamente acoplado ao nuclídeo Ru101.

## CAPITULO 3

**3.1-Introdução**

**3.2- Maiores Absorvedores de Neutrons**

**3.3- Pseudo Produtos de Fissão**

### **3.1 Introdução**

Neste capítulo será apresentado um estudo a respeito da absorção de neutrons devido aos produtos de fissão ao longo da queima do combustível.

Esta absorção de neutrons pelos produtos de fissão é chamada, comumente de envenenamento parasitário, pois este efeito acarreta numa perda da reatividade do sistema. Com o advento dos reatores de potência para geração de energia elétrica torna-se necessário o estudo detalhado desta absorção, pois este efeito afeta a vida útil do combustível dentro do reator nuclear. Este tema tem sido objeto de estudo de vários autores /16,18,23,38,62,73,80/.

O estudo neste Capítulo a respeito dos produtos de fissão quanto à absorção terá como objetivo:

a) Identificar os principais absorvedores de neutrons num reator típico PWR.

b) Analisar o comportamento desta absorção com relação ao grupo de energia, "yield" de fissão e à queima.

c) Propor um novo conjunto de cadeias lineares dos produtos de fissão para o código CINDER 2.

Com relação aos três itens relativos à absorção, estes constituem uma análise qualitativa e quantitativa da absorção de neutrons pelos produtos de fissão a fim de resultar num procedimento para escolha e definição das cadeias lineares para o CINDER-2. Estas novas cadeias servirão de base para o acoplamento dos sistemas HAMMER-TECHNION e CINDER-2.

### **3.2 Maiores Absorvedores**

O envenenamento causado pelos produtos de fissão tem efeitos importantes sob o ponto de vista neutrônico. Muitos produtos de fissão têm seções de choque e/ou concentrações razoáveis de forma que acarretam numa competição na população neutrônica com o combustível, afetando a reatividade do sistema e implicando em vários problemas para o reator.

Para avaliar o comportamento da absorção de neutrons pelos produtos de fissão ao longo da queima, inicialmente procedeu-se a uma identificação destes nuclídeos e uma classificação. Para tal procedimento adotou-se um reator típico PWR, esta avaliação constituir-se-á futuramente, numa base para elaboração das cadeias lineares para os produtos de fissão. Estas cadeias servirão ao código CINDER-2 que, por sua vez consistirá num módulo para o cálculo de transmutação no código de cálculo celular HAMMER-TECHNION.

A identificação dos maiores absorvedores será baseada no seguinte problema dado na tabela abaixo:

**Tabela 3.1: Dados referentes à célula combustível de ANGRA-I**

Reator típico PWR: ANGRA-1	
Condições do problema:	
1-	região de enriquecimento 3.1%
2-	Tempo de irradiação: 1043 dias
3-	densidade de potência: 108.8 W/cm <sup>3</sup>
4-	temperatura do moderador: 307.8 °C
5-	temperatura do combustível : 732.0 °C
6- dimensões:	
6.1-	raio interno da vareta combustível: 0.4178 cm
6.2	raio externo da vareta combustível: 0.4750 cm
6.3	distância centro a centro das varetas : 1.232 cm
6.4	raio do "pellet" : 0.4095 cm
6.5	" Buckling " : 4.588 m <sup>-2</sup>

Inicialmente, com os dados da tabela acima efetuou-se o cálculo celular com o código HAMMER-TECHNION/CITHAM, versão disponível no IPEN/CNEN, que efetua cálculo celular com queima. Este cálculo com o código HAMMER-TECHNION tem a finalidade de gerar as seções de choque em quatro grupos de energia dos nuclídeos actínídeos para o CINDER-2. Estas seções de choque são para cada intervalo de tempo, portanto está considerado o efeito da queima nestas seções de choque. Esta versão do HAMMER-TECHNION considera explicitamente as cadeias do Xe135 e Sm149 no cálculo da queima e os demais produtos de fissão são considerados em forma de pseudo-produtos de fissão. O tratamento dos produtos de fissão em forma de pseudo-produtos de fissão será discutido posteriormente .

Com as seções de choque dos actinídeos por grupo de energia e as razões de fluxo por intervalo de tempo procede-se ao cálculo com o código CINDER-2. No cálculo com CINDER-2 escolhe-se o mesmo número de intervalos de tempo adotado no cálculo com o código HANMER-TECHNION, pois as seções de choque geradas no cálculo celular com queima são dependentes dos intervalos de tempo utilizados.

Com relação ao intervalo tempo adotou-se um número de 27, sendo que o primeiro intervalo de tempo utilizado foi de 3 dias e os demais de 40 dias.

Tais intervalos de tempo foram tomados para descrever inicialmente, o equilíbrio do nuclídeo Xe135 e posteriormente o equilíbrio do nuclídeo Sm149.

O cálculo da absorção executado pelo código CINDER-2 fornece a taxa de absorção percentual de um nuclídeo com relação aos demais nuclídeos num dado intervalo de tempo.

A taxa de absorção total é calculada como sendo:

$$R_T = \sum_{i=1}^4 \phi_i \Sigma_i \quad (3.2.1)$$

onde:

$\phi_i$  = fluxo integral do grupo de energia  $i$

$\Sigma_i$  = seção de choque macroscópica do grupo de energia  $i$  total por nuclídeo

A taxa de absorção também pode ser definida para outras faixas de energia individualmente:

$$R_k = \phi_k \Sigma_k \quad (\text{região térmica}) \quad (3.2.2)$$

$$k_3 = \phi_3 \Sigma_3 \quad (\text{região epitérmica}) \quad (3.2.3)$$

$$k_2 = \sum_{i=1}^3 \phi_i \Sigma_i \quad (\text{região de ressonância}) \quad (3.2.4)$$

os intervalos de energia considerados por grupo são:

Tabela 3.2: Estrutura de grupos de energia no código CINDER-2

Grupo	Energia (eV)
1	1.0000E+07
2	8.2085E+05
3	5.5308E+01
4	0.8250E+00
	1.0000E-05

Dessa forma identificaram-se os principais absorvedores de neutrons com relação aos demais, esta identificação procedeu-se considerando a absorção total, absorção na faixa térmica e na faixa epitérmica.

As tabelas a seguir ilustram os principais absorvedores para cada caso com seus respectivos percentuais de absorções.

**Tabela 3.3: Principais absorvedores de neutrons, ordenados em forma decrescente segundo o percentual de absorção total com relação aos produtos de fissão, para o tempo de irradiação igual a 12552 Horas.**

Nuclídeo	Percentual de Absorção Total (Grupol-4)
Xe135	25.781571
Sm149	8.405440
Nd143	8.350040
Rh103	7.727260
Xe131	5.940760
Pm147	5.623980
Cs133	5.006270
Tc 99	3.824020
Sm151	3.736860
Sm152	3.544160
Nd145	2.299690
Eu153	1.733720
Mo 95	1.393280
Ag109	1.251600
Rh105	1.210030
Ru101	1.163070
Sm150	1.002280
Eu155	0.929180
Eu154	0.784300
Pm148	0.588870
Kr 83	0.570040
Pd105	0.542980
Pr141	0.519774

Tabela 3.4: Principais absorvedores de neutrons, ordenados em forma decrescente segundo percentual de absorção total com relação aos produtos de fissão, para o tempo de irradiação igual a 25032 Horas.

Nuclideo	Percentual de Absorção Total Grupo(1-4)
Xe135	15.42276
Rh103	9.67364
Nd143	8.79382
Xe131	8.35613
Cs133	8.12183
Sm148	5.72967
Tc 99	4.72558
Pm147	4.37527
Sm152	3.92488
Sm151	3.32064
Eu153	2.98868
Nd145	2.74518
Ag109	2.23341
Eu155	2.12299
Eu154	2.09208
Mo 95	1.73766
Pm148m	1.73750
Ru101	1.54345
Sm150	1.49517
Rh105	1.12649
Cs134	1.05631
Pd105	0.93023
Pr141	0.71011

As Tabelas 3.3 e 3.4 apresentam os principais absorvedores de neutrons para dois tempos de irradiação do combustível do problema exemplo(ANGRA-1). As tabelas listam os principais produtos de fissão responsáveis pela maioria das absorções de neutrons com seus respectivos valores percentuais de absorção.

O valor percentual correspondente a um dado nuclídeo é tomado considerando o em relação aos demais produtos de fissão, além disso, esta absorção total corresponde a soma das absorções nas quatro regiões de energia.

Tomando a Tabela 3.3 observa-se que os nuclídeos Xe135, Sm149, Nd143, Rh103, Xe131 contribuem aproximadamente com 56% das absorções de neutrons e os demais nuclídeos contribuem com o restante das absorções.

Excluindo o nuclídeo Xe135, com relação às Tabelas 3.3 e 3.4 observa-se que ocorre uma alteração na ordem de classificação dos nuclídeos entre estas duas tabelas, neste contexto destaca-se o nuclídeo Sm149, pois este se apresenta como o segundo nuclídeo mais importante em termos de absorção na Tabela 3.3 e passa a ser o sexto nuclídeo na classificação conforme a Tabela 3.4.

**Tabela 3.5: Principais absorvedores de neutrons na região térmica, ordenados em forma decrescente segundo o percentual com relação aos produtos de fissão, para o tempo de irradiação igual a 12552 Horas.**

<b>Nuclídeo</b>	<b>Percentual de absorção térmica (grupo 4)</b>
Xe135	41.39758
Sm149	13.34591
Nd143	11.73943
Sm151	5.32922
Rh103	4.28973
Pm148m	3.31805
Xe131	1.86894
Pm147	1.82515
Rh105	1.55151
Cs133	1.54998
Eu155	1.30857
Nd145	1.23300
Sm150	1.11406
Sm152	0.98420
Tc 99	0.96690
Eu153	0.92135
Kr 83	0.88757
Eu154	0.85948
Mo 95	0.52781
Pr141	0.49318
La139	0.46215
Gd157	0.33756

Tabela 3.6: Principais absorvedores de neutrons na região térmica, ordenados em forma decrescente segundo o percentual com relação aos produtos de fissão, para o tempo de irradiação igual a 25032 Horas.

Nuclídeo	Percentual de absorção térmica (grupo 4)
Xe135	28.45437
Nd143	14.24315
Sm149	10.45536
Rh103	6.25549
Sm151	5.45294
Eu155	3.44424
Pm148m	3.10351
Xe131	2.33634
Cs133	2.21518
Eu154	2.04156
Sm150	1.92236
Eu153	1.84965
Nd145	1.71524
Rh105	1.66653
Pm147	1.65893
Tc 99	1.39785
Sm152	1.27408
Cs134	1.27332
Mo 95	0.88992
Kr 83	0.81641
Pr141	0.78115
La139	0.70784
Ag109	0.69381
Pd105	0.47248

As Tabelas 3.5 e 3.6 ilustram os principais nuclídeos absorvedores de neutrons na região de energia térmica com os seus respectivos percentuais de absorção para dois tempos de irradiação do combustível.

Na Tabela 3.5 os dois principais nuclídeos absorvedores de neutrons, Xe135 e Sm149, contribuem com aproximadamente 55% das absorções térmicas enquanto que na Tabela 3.6. estes mesmos nuclídeos contribuem aproximadamente com 40% das absorções térmicas. Com relação aos nuclídeos Sm149 e Nd143 ocorre uma inversão na ordem de classificação da Tabela 3.5 para a Tabela 3.6.

Nestas duas tabelas identificamos os principais absorvedores de neutrons na região térmica e a maioria destes tem uma seção de choque de captura e "yields" altos nesta região.

**Tabela 3.7: Principais absorvedores de neutrons na região epitérmica, ordenados em forma decrescente segundo o percentual em relação aos produtos de fissão, para o tempo de irradiação igual a 12552 Horas.**

Nuclídeo	Percentual de absorção epitérmica (Grupo 3)
Rh103	13.55419
Xe131	12.88153
Pm147	12.06060
Cs133	10.77276
Tc 99	8.51341
Sm152	7.90769
Nd145	4.06096
Eu153	3.08355
Ag109	2.80623
Mo 95	2.80416
Nd143	2.74725
Ru101	2.69957
Sm151	1.12685
Pm148	1.08747
Zr 93	1.00673
Eu154	0.99917
Pd105	0.96797
Sm147	0.95226
Sm150	0.80084
Pd106	0.73228
Rh105	0.65964
Pr141	0.54761
Mo 97	0.53633

**Tabela 3.8: Principais absorvedores de neutrons na região epitérmica, ordenados em forma decrescente segundo o percentual em relação aos produtos de fissão, para o tempo de irradiação igual a 25032 Horas.**

Nuclídeo	Percentual de absorção epitérmica (Grupo 3)
Rh103	13.90874
Xe131	11.33161
Cs133	10.83411
Tc 99	8.68088
Pm147	7.71395
Sm152	7.20352
Eu153	4.35611
Ag109	4.12011
Nd145	3.97535
Mo 95	2.95751
Ru101	2.34552
Nd143	2.17655
Eu154	1.36352
Pd105	1.28280
Pd108	1.25147
Sm147	1.01080
Zr 93	0.97242
Sm150	0.81115
Sm151	0.81010
Pm148	0.80049
Cs134	0.78567
Pd107	0.68683
Pr141	0.57488
Cs135	0.57423

As Tabelas 3.7 e 3.8 ilustram os principais nuclídeos absorvedores de neutrons na região epitérmica com os respectivos percentuais de absorções para dois tempos de irradiação do combustível.

Com estas duas tabelas identificamos os principais nuclídeos responsáveis pelas absorções na região epitérmica.

Comparando as Tabelas 3.7 e 3.8 observa-se que não existe nenhum nuclídeo destacadamente responsável pela maioria das absorções como no caso da região térmica onde o nuclídeo Xe135 é um grande absorvedor de neutrons, além disto, os valores percentuais das absorções nas duas tabelas não alteram sensivelmente com o tempo de irradiação.

Importante observar que nuclídeos como Rh103, Xe131, Pm147 e Cs133 estão entre os principais absorvedores tanto na região térmica, quanto na região epitérmica, além disso a maioria destes nuclídeos são considerados como sendo não saturantes segundo o comportamento ao longo da queima.

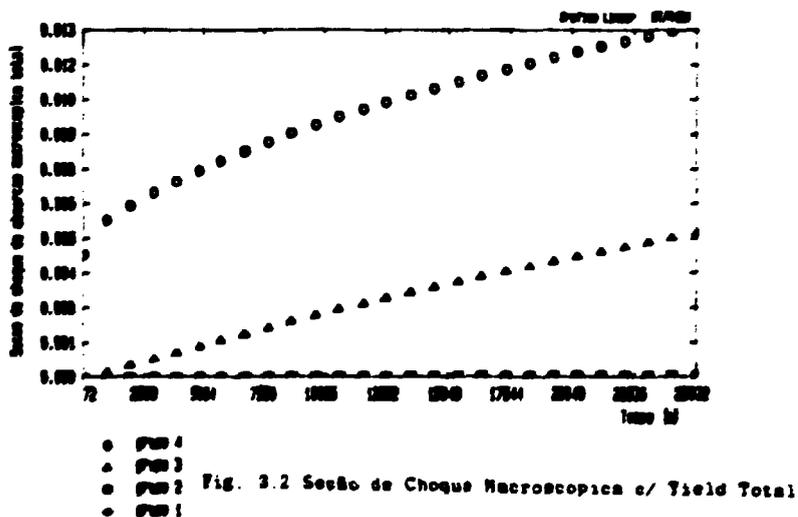
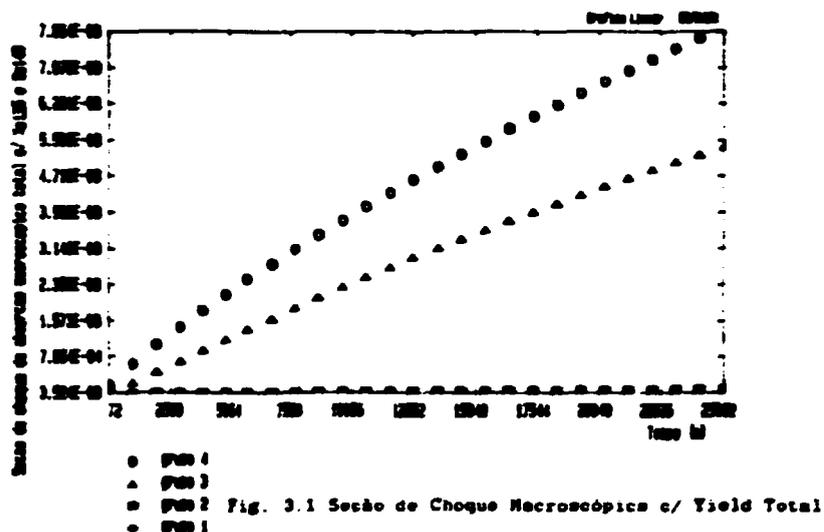
Após proceder à identificação, de uma forma global, dos maiores absorvedores de neutrons, tomou-se um estudo mais detalhado dos maiores absorvedores. Neste estudo considerou-se a contribuição do termo "yield", isto é, executou-se o mesmo problema discriminando-se o termo "yield" de fissão dos nuclídeos físeis. Este procedimento é possível na medida em que a equação de transmutação é linear no termo "yield", portanto pode ser considerado separadamente e o efeito global é a soma dos efeitos parciais.

Nesta análise foram identificados os maiores absorvedores segundo o "yield" do nuclídeo U235 e o "yield" do Pu239,

somente. Esta parte da identificação através de "yield" discriminado constitui um fato importante pois num reator típico PWR, existe a conversão do nuclídeo U238 para o nuclídeo Pu239 ao longo da queima do combustível, dessa forma o nuclídeo Pu239 contribui para as fissões e conseqüentemente, para a produção de produtos de fissão.

Como resultado desta análise será apresentado uma série de figuras mostrando os principais resultados obtidos.

Inicialmente as duas Figuras abaixo mostram a evolução da seção de choque de absorção macroscópica nos quatro grupos de energia, em função do tempo de irradiação do combustível.



A Figura 3.2 é referente à seção de choque de absorção macroscópica de todos os produtos de fissão em cada grupo de energia, enquanto que a Figura 3.1 representa a mesma quantidade excluindo-se as contribuições devido aos nuclídeos Xe135 e Sm149.

Com relação as duas figuras observa-se:

a) importância dos nuclídeos Xe135 e Sm149 em termos de absorção de neutrons do sistema.

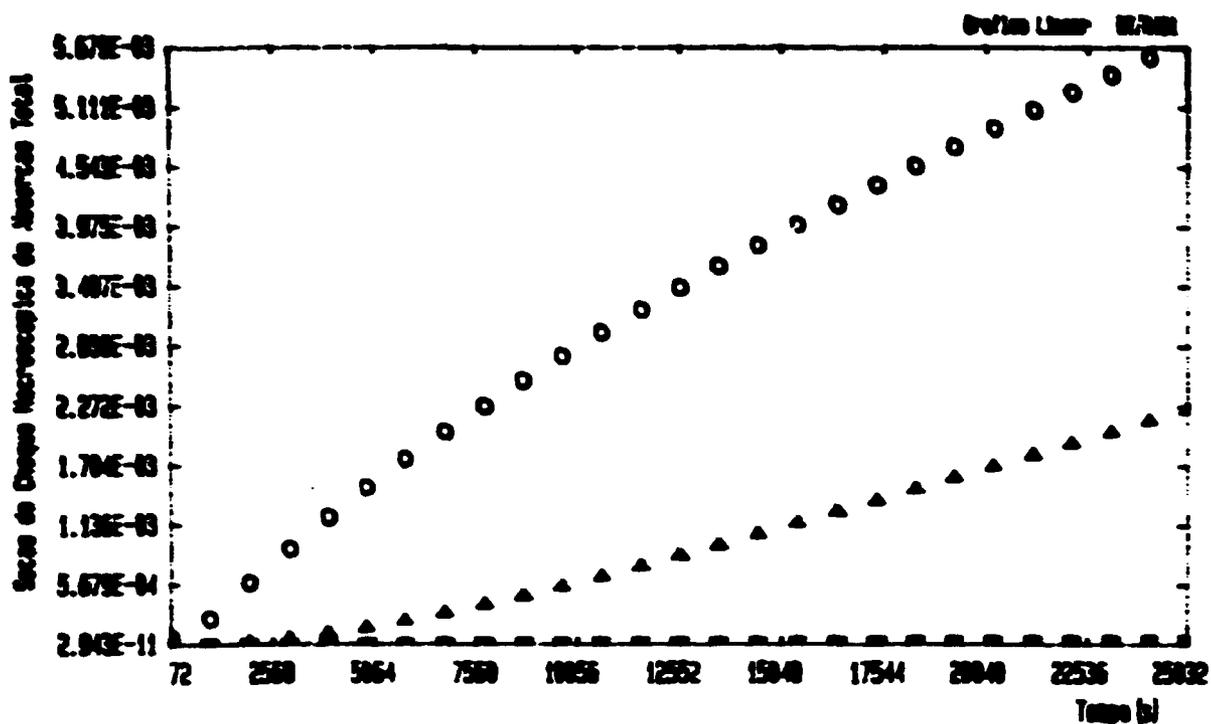
b) a Figura 3.1 mostra o comportamento predominante dos nuclídeos classificados como lineares nos grupos 4 e 3.

c) as contribuições das seções de choques macroscópicas do grupo 1 e 2 são muito menores comparadas com os grupos 3 e 4.

d) a Figura 3.2 mostra a influência dos nuclídeos Sm149 e Xe135 no grupo 4 de tal forma que a curva referente ao grupo 4 tende a atingir a saturação.

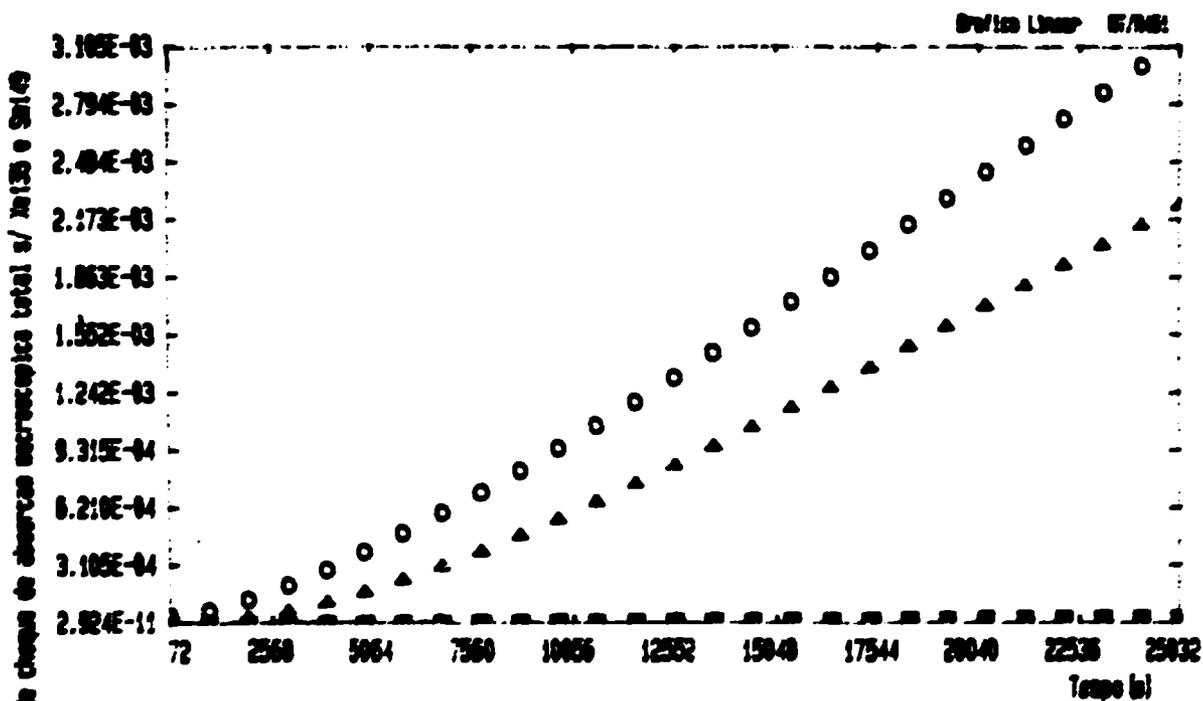
Os resultados destas figuras são globais em termos do fator "yield", de maneira que, para analisar o efeito isolado de um "yield" é necessário considerar o problema com apenas um nuclídeo fissil ou fissionável.

Desta forma as Figuras a seguir (3.3,3.4,3.5,3.6) ilustram o comportamento da seção de choque macroscópica de absorção de cada grupo de energia com o tempo de irradiação do combustível.



- Grupo 4
- ▲ Grupo 3
- ◻ Grupo 2
- ◆ Grupo 1

Fig. 3.3 Seção de Choque Macroscópica c/ Yield Pu239



- Grupo 4
- ▲ Grupo 3
- ◻ Grupo 2
- ◆ Grupo 1

Fig. 3.4 Seção de Choque Macroscópica c/ Yield Pu239

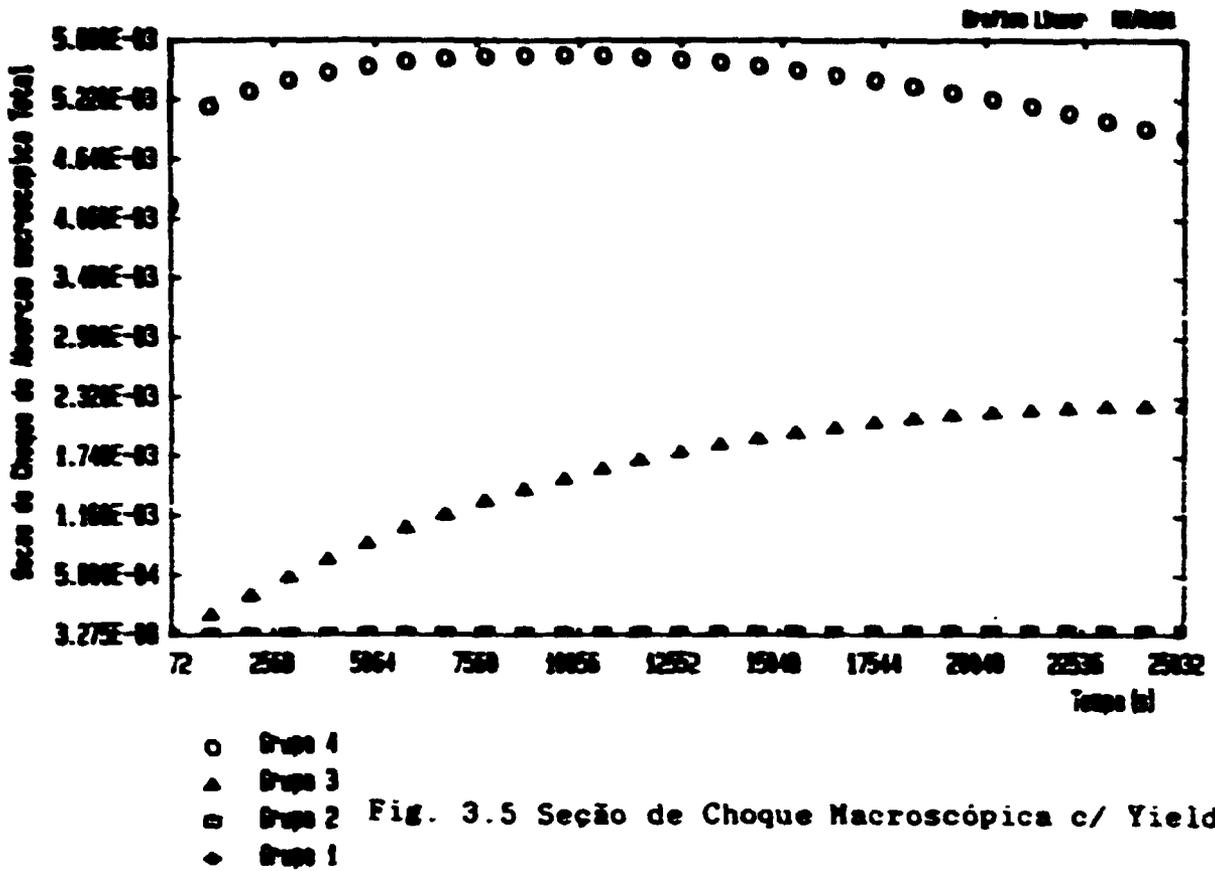


Fig. 3.5 Seção de Choque Macroscópica c/ Yield U235

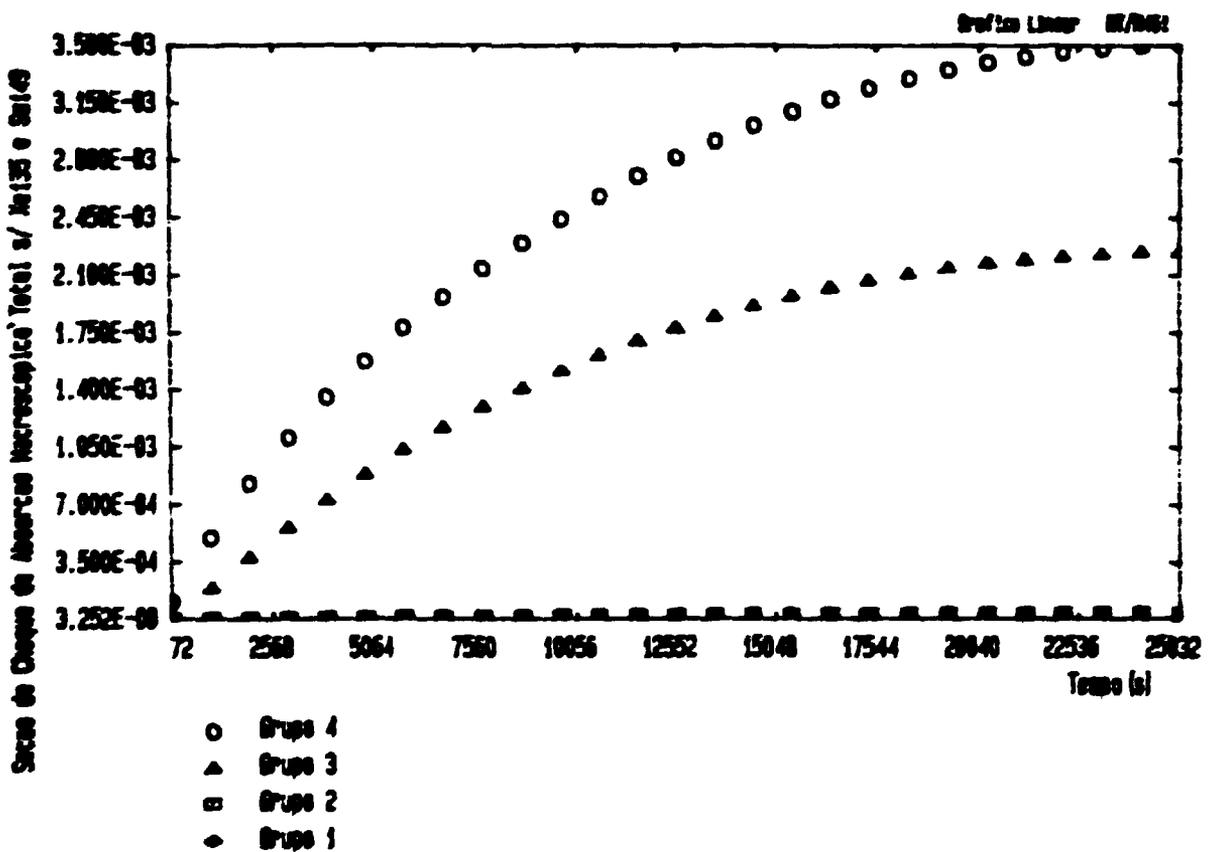


Fig. 3.6 Seção de Choque Macroscópica c/ Yield U235

A Figura 3.3. é referente à seção de choque macroscópica de absorção total por grupos de energia considerando-se as fissões apenas no nuclídeo actínideo Pu239 e a Figura 3.4. é referente a mesma quantidade, excluindo-se as contribuições dos nuclídeos Xe135 e Sm149.

Analogamente, as Figuras 3.5 e 3.6 respectivamente representam as mesmas quantidades, mas considerando-se fissões apenas no nuclídeo actínideo U235.

Fazendo uma breve comparação entre as Figuras(3.3,3.4,3.5,3.6) temos as seguintes observações:

a) as Figuras 3.3 e 3.5 mostram a importância do termo "yield" do Pu239, pois na Figura 3.5 a seção de choque macroscópica de absorção tem um comportamento saturante no grupo 4, enquanto que a Figura 3.3 mostra um comportamento linear da mesma quantidade no mesmo grupo.

Como decorrência desta observação temos que o nuclídeo actínideo Pu239 tem grande importância na formação dos produtos de fissão com comportamento linear.

b) na Figura 3.6., observa-se que o comportamento da seção de choque macroscópica do grupo 3 e 4 são saturantes a partir de um determinado tempo, enquanto que, as mesmas curvas na Figura 3.4 mostram ter um comportamento linear, conseqüentemente, observa-se a importância do nuclídeo actínideo U235 na formação de produtos de fissão com o comportamento saturante.

c) nas Figuras 3.3 e 3.4 observa-se a influência dos nuclídeos Xe135 e Sm149 principalmente no grupo 4, que é perfeitamente razoável pois sabe-se que, estes nuclídeos são grandes absorvedores de neutrons térmicos.

Nesta fase preliminar de análise observando o conjunto de Figuras (3.1-3.6) fica claramente evidenciada a importância do termo "yield".

Devido à importância do grupo térmico, serão apresentadas a seguir algumas figuras de seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico considerando-se vários "yields", inclusive o "yield" total em função do tempo de irradiação.

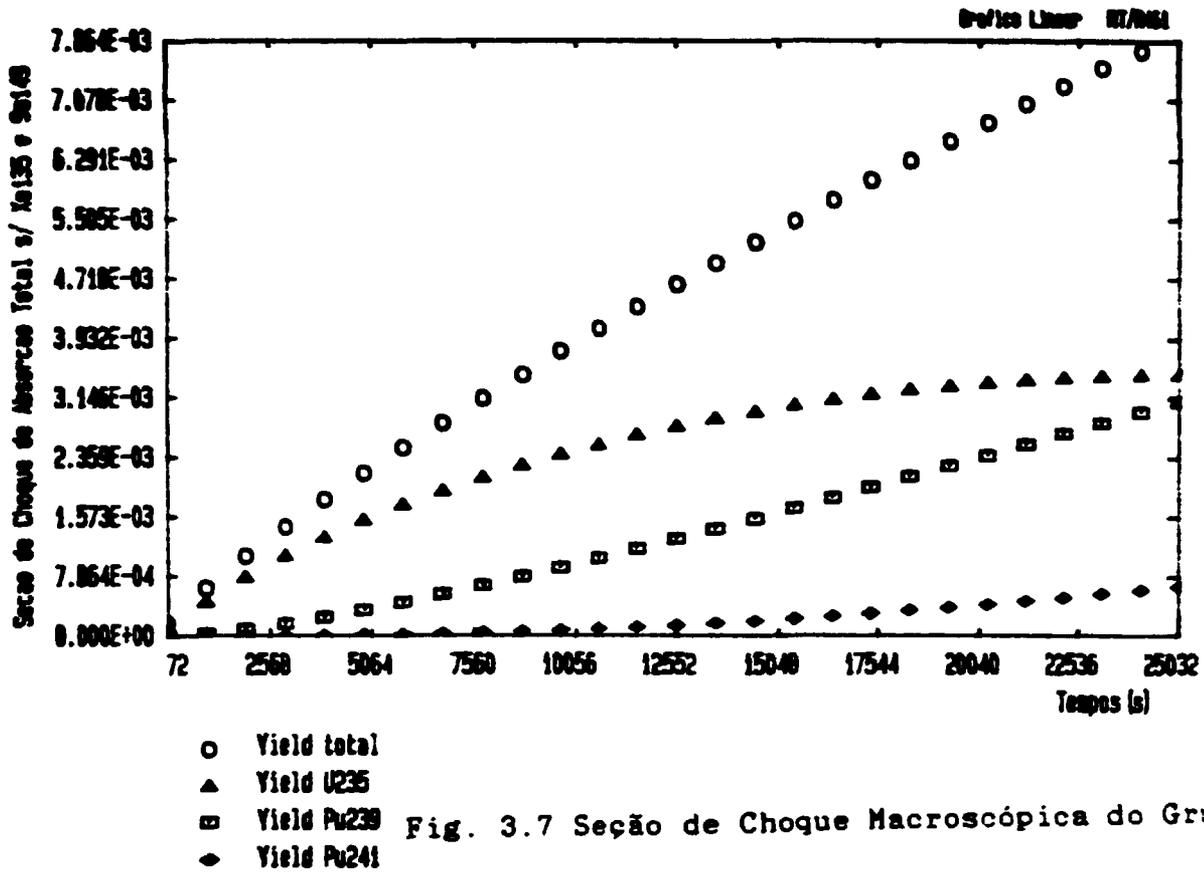


Fig. 3.7 Seção de Choque Macroscópica do Grupo-4

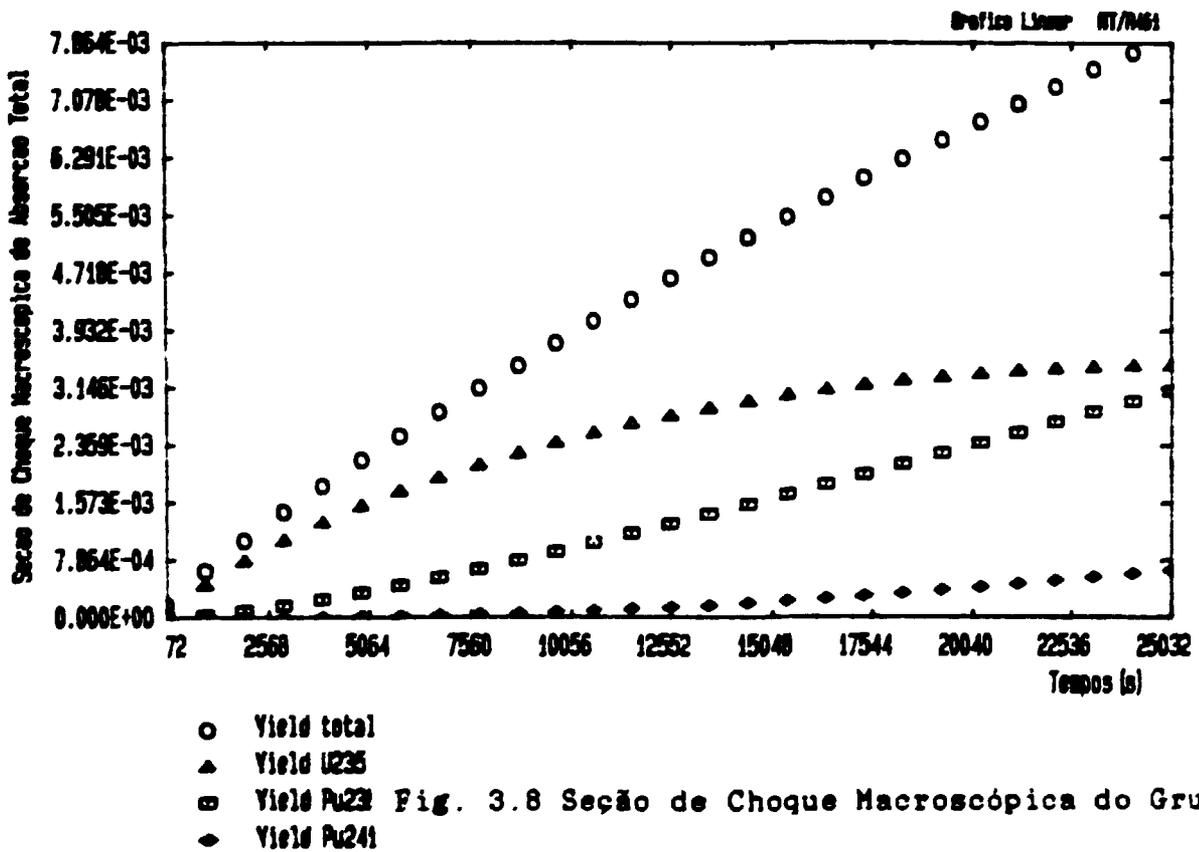


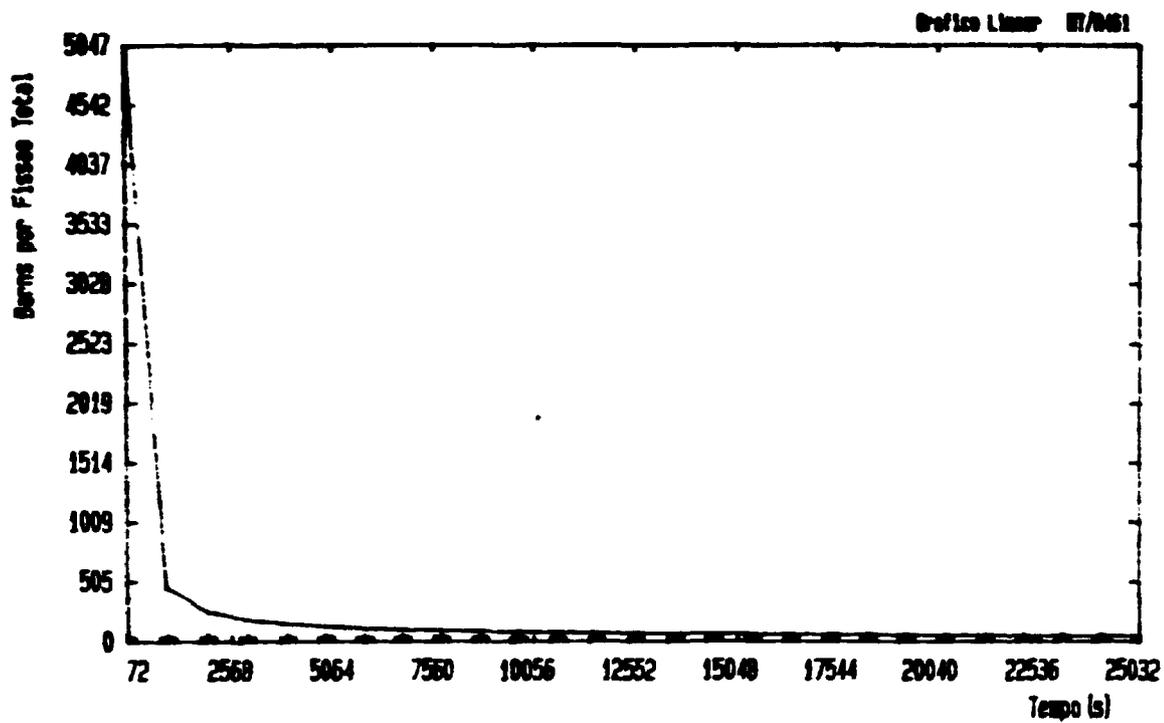
Fig. 3.8 Seção de Choque Macroscópica do Grupo-4

A Figura 3.8 é referente à seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico considerando todos os produtos de fissão, enquanto que a Figura 3.7 é referente a mesma quantidade, excluindo-se as contribuições dos nuclídeos Xe135 e Sm149. A contribuição das fissões do nuclídeo actínico Pu239 na seção de choque macroscópica de absorção tem um comportamento linear e supera o valor da mesma quantidade, considerando as fissões do U235.

Outra grandeza, além da seção de choque macroscópica de absorção, que mostra a importância das absorções de neutrons devido aos produtos de fissão é a grandeza barns por fissão.

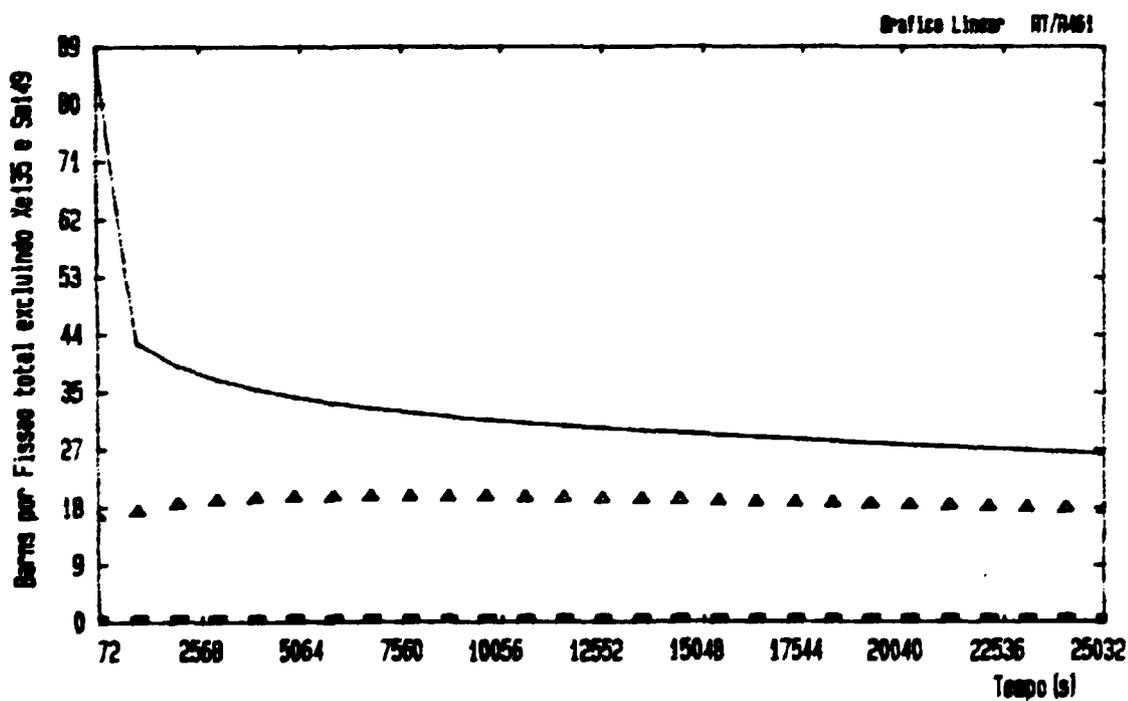
Esta grandeza é fundamental para expressar as absorções pelos produtos de fissão, representa a razão entre duas quantidades, isto é, define-se barns por fissão como sendo a razão entre a seção de choque macroscópica de absorção dividido pelo número total de fissões acumuladas até um determinado tempo.

As Figuras 3.9 e 3.10 ilustram o comportamento da grandeza, barns/fissão, para quatro grupos de energia em função do tempo de irradiação.



- Grupo 4
- ▲ Grupo 3
- Grupo 2
- ◆ Grupo 1

Fig. 3.9 Barras por Fissão Considerando Yield Total



- Grupo 4
- ▲ Grupo 3
- Grupo 2
- ◆ Grupo 1

Fig. 3.10 Barras por Fissão Considerando Yield Total

A Figura 3.9 representa a grandeza barns/fissão para cada grupo de energia considerando-se todos os produtos de fissão em função do tempo, enquanto que a Figura 3.10 mostra a mesma grandeza excluindo-se as contribuições dos nuclídeos Xe135 e Sm149.

Comparando as Figuras 3.9 e 3.10 observa-se o efeito dos nuclídeos Xe135 e Sm149 no grupo térmico, a Figura 3.10 mostra de uma forma mais representativa a grandeza barns/fissão para os grupos 3 e 4 .

No grupo 4 ocorre uma depressão no início da vida e se mantém constante devido ao equilíbrio do xenônio ( Xe135 ) e a partir daí a curva mantém-se quase constante com o tempo, enquanto no grupo 3 a curva é quase constante ao longo do tempo.

Completando a análise em termos de seção de choque macroscópica de absorção, apresentamos alguns nuclídeos com as respectivas figuras, mostrando a importância do termo "yield" e o comportamento da seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico.

Foram escolhidos dois nuclídeos para exemplificar algumas das observações já feitas neste Capítulo e no Capítulo anterior.

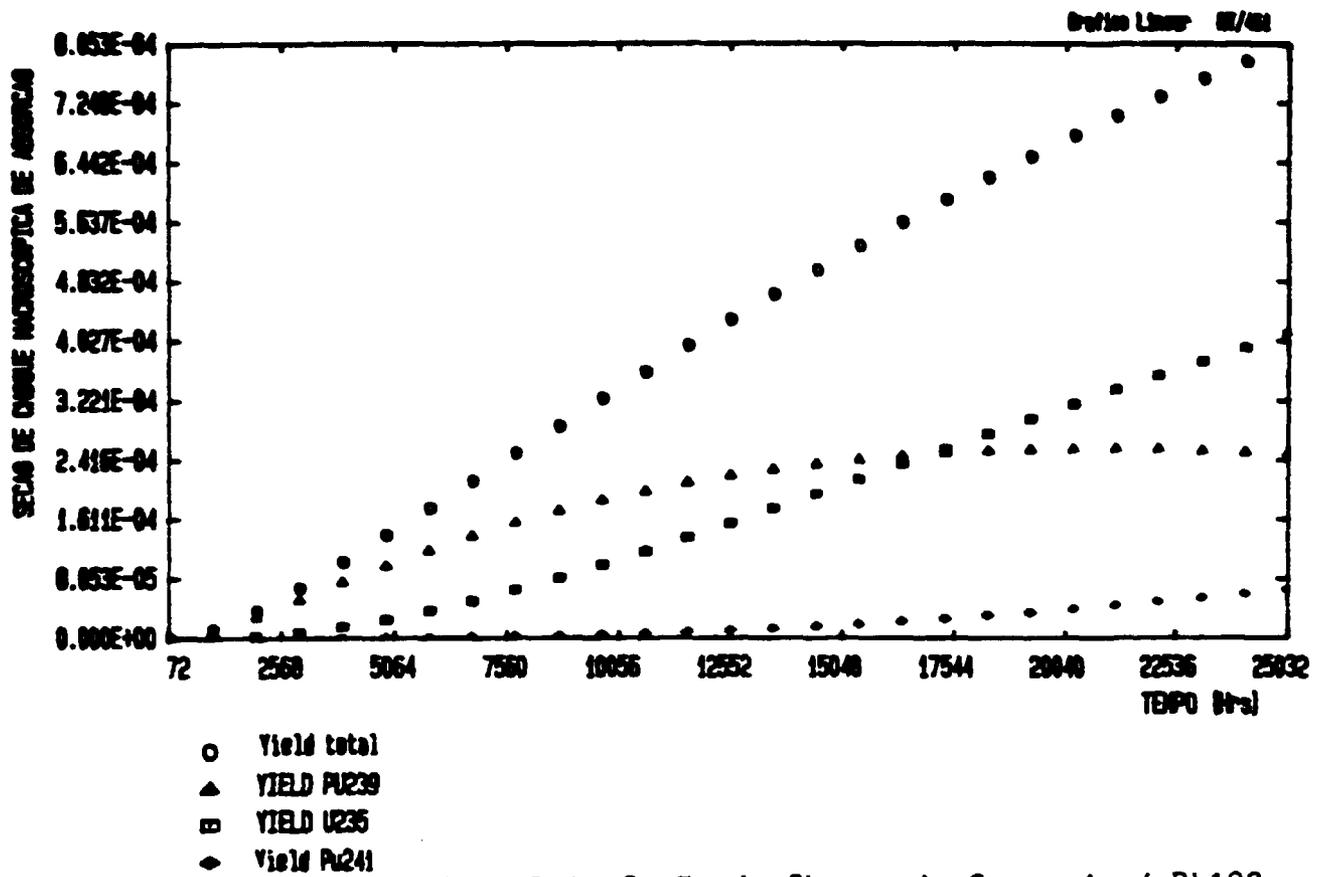


Fig. 3.11 Seção de Choque do Grupo 4 p/ Rh103

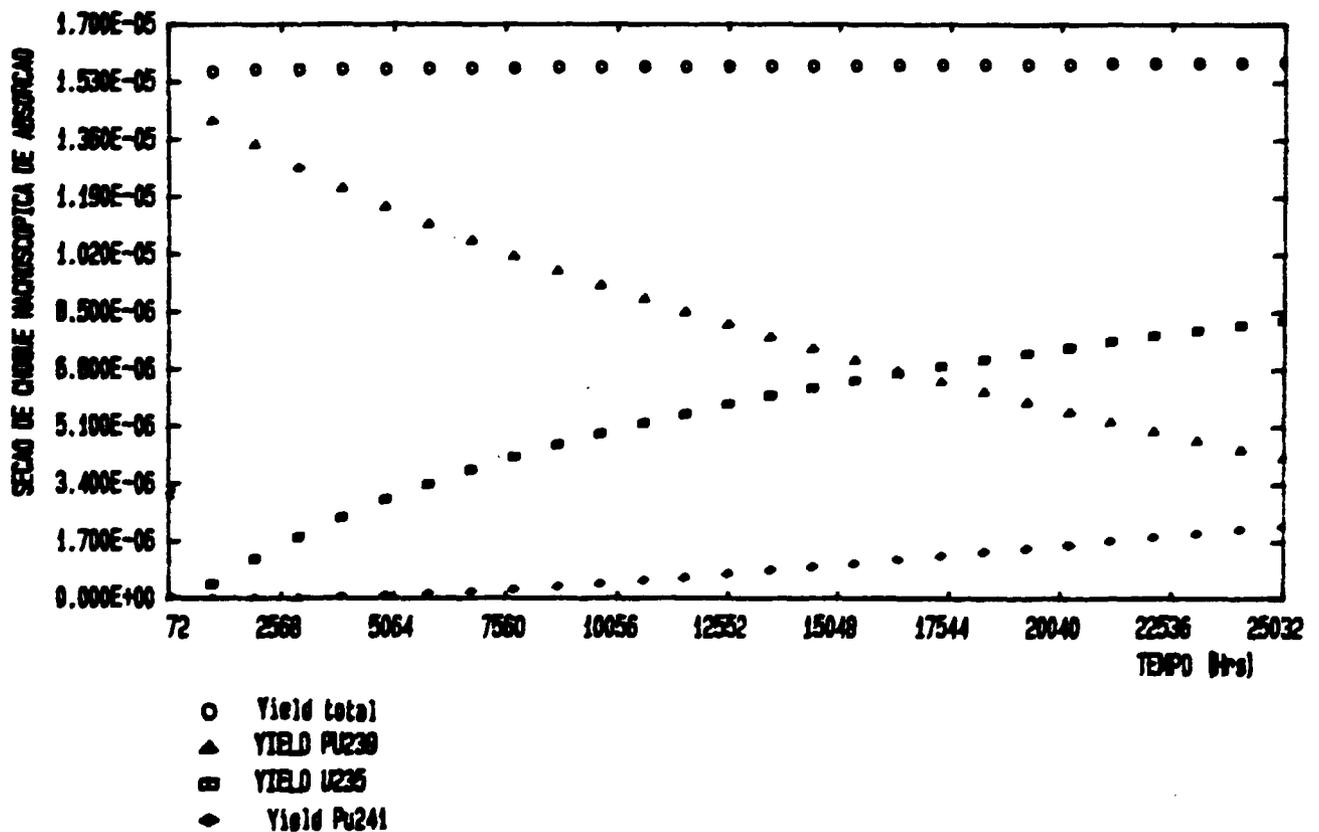


Fig. 3.12 Seção de Choque do Grupo 4 p/ Xe133

Inicialmente, a Figura 3.11 é referente ao nuclídeo Rh103, representando a quantidade seção de choque de absorção macroscópica do grupo térmico para vários "yields" e o "yield" total.

Nesta figura observa-se que a contribuição na seção de choque devido ao nuclídeo actínideo Pu239 supera a seção de choque devido ao nuclídeo actínideo U235, mostrando a importância deste em certos nuclídeos. Além disso o comportamento da curva com relação ao "yield" total é linear, neste sentido este nuclídeo tem um comportamento linear em relação à densidade, fato apresentado no capítulo anterior.

A outra figura é referente ao nuclídeo Xe133, a Figura 3.12 mostra o comportamento saturante deste nuclídeo em termos de "yield" total, ao contrário do nuclídeo Rh103.

Com relação ao termo "yield" individual do nuclídeo actínideo U235 e Pu239, temos uma curva decrescente considerando o termo "yield" devido ao U235, e crescente, considerando o termo "yield" do Pu239.

Através da análise efetuada com relação aos maiores absorvedores e da análise das cadeias de transmutação efetuada no Capítulo anterior, pode-se esquematizar um novo conjunto de cadeias lineares para o código CINDER-2.

O procedimento adotado para a formulação das cadeias lineares segue as seguintes linhas:

a) considerar as cadeias que envolvam os principais absorvedores

b) considerar apenas as principais cadeias, isto é através da técnica da cadeia linear( ver Apêndice.A) um dado nuclídeo pode estar em mais de uma cadeia, podendo-se optar pelas cadeias principais.

c) utilizar as informações do capítulo anterior ,a fim de verificar o acoplamento e a partir disto "quebrar" a cadeia num determinado nuclídeo.

d) observar a disponibilidade em termos de dados nucleares para determinados nuclídeos, vantagens e desvantagens do ponto de vista computacional.

Neste conjunto de procedimentos é importante observar que, a princípio, um dado nuclídeo considerado maior absorvedor necessariamente será considerado em alguma cadeia. Com relação ao item d) do procedimento precisa-se verificar um dado nuclídeo considerado entre os maiores absorvedores consta de dados nucleares, pois posteriormente será elaborada uma biblioteca de seção de choque para estes nuclídeos para o sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2.

Desta forma elaborou-se um novo conjunto de cadeias lineares tal que os nuclídeos considerados são responsáveis por mais de 99% das absorções tanto na região térmica quanto na região epitérmica, tomando como referência a biblioteca original do Cinder-2.

Ilustra-se abaixo o novo conjunto de cadeias elaboradas através do procedimento acima.

#### CADEIAS DOS PRODUTOS DE FISSÃO

- 1- Br81-> Br82-> Kr82-> Kr83-> Kr84
- 2- Kr89-> Rb89-> Sr89-> Y 89-> Y 90
- 3- Sr90-> Sr91-> Y 91-> Zr91-> Zr92-> Zr93
- 4- Y 93-> Zr93
- 5- Zr94-> Zr95-> Nb95-> Mo95-> Mo96-> Mo97
- 6- Zr94-> Zr95-> Nb95M-> Mo95-> Mo96-> Mo97

- 7- Zr96-> Zr97-> Nb97-> Mo97-> Mo98-> Mo99-> Tc99M->  
->Ru100-> Ru101
- 8- Mo98-> Mo99-> Tc99-> Ru100-> Ru101
- 9- Mo100-> Ru101-> Ru102-> Ru103-> Rh103-> Pd104->  
->Pd105-> Pd106-> Pd107
- 10- Ru104-> Ru105-> Rh105-> Pd105
- 11- Ru104-> Ru105-> Rh105-> Pd106
- 12- Ru106-> Pd106-> Pd107-> Pd108-> Pd109-> Ag109
- 13- Pd109-> Ag109-> Cd110
- 14- Pd110-> Ag111-> Cd111-> Cd112-> Cd113-> Cd114->  
->Cd115-> In115
- 15- Pd112-> Cd112-> Cd113-> Cd114-> Cd115-> In115
- 16- Cd114-> Cd115M-> In115
- 17- Sb129-> Te129M-> Te129-> I129-> Xe130-> Xe131
- 18- Sb129-> Te129-> I129-> I130-> Xe130-> Xe131
- 19- Sb129-> Te129M-> I129-> I130-> Xe130-> Xe131
- 20- Te131M-> I131-> Xe131-> Xe132-> Xe133-> Cs133
- 21- Te132-> I132-> Xe132-> Xe133-> Cs133-> Cs134
- 22- I133-> Xe133-> Xe134-> Xe135
- 23- I133-> Xe133M-> Xe133-> Cs133
- 24-I133->Xe133->Cs133->Cs134->Cs135
- 25- I133-> Xe133-> Cs133-> Cs134
- 26- Te134-> I134-> Xe134-> Xe135-> Cs135
- 27- I135-> Xe135-> Cs135
- 28- I135-> Xe135M-> Xe135-> Xe136
- 29- I135-> Xe135M-> Xe135-> Cs135
- 30- Xe138-> Cs138-> Ba138-> Ba139-> La139-> La140->  
-> Ce140
- 31- Ba140-> La140-> Ce140-> Ce141-> Pr141

- 32- Ba141-> La141-> Ce141-> Pr141-> Pr142-> Nd142->  
->Nd143
- 33- Ba142-> La142-> Ce142-> Ce143-> Pr143-> Nd143->  
-> Nd144-> Nd154
- 34- Ce143-> Ce144-> Nd144-> Nd145
- 35- Ce143-> Ce144-> Pr145-> Nd145
- 36- Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Pm148H->  
-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152-> Sm153->  
-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Gd156
- 37- Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Pm148->  
-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152-> Sm153->  
-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Eu156-> Gd156
- 38- Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Sm147->  
-> Sm148-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152
- 39- Pr145-> Nd145-> Nd146-> Sm147-> Pm147-> Pm148H->  
-> Pm148-> Sm148-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152
- 40- Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Pm148->  
-> Sm148-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152
- 41- Nd147-> Pm147-> Pm148H-> Pm149-> Sm150-> Sm151
- 42- Nd147-> Nd148-> Pm149-> Sm149
- 43- Nd148-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152->  
-> Sm153-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Eu156-> Gd156->  
-> Gd157
- 44- Nd148-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152->  
-> Sm153-> Eu153-> Eu154-> Gd154-> Gd155
- 45- Nd148-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152->  
-> Sm153-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Gd155
- 46- Pm149-> Sm149
- 47- Nd150-> Pm151-> Sm151-> Sm152-> Sm153-> Eu153->  
-> Eu154-> Eu155-> Gd155
- 48- Nd150-> Pm151-> Sm151-> Sm152-> Sm153-> Eu153->  
-> Eu154-> Gd154-> Gd155
- 49- Pm151-> Sm152-> Sm153
- 50- Sm154-> Eu155-> Eu156-> Gd156-> Gd157
- 51- Sm154-> Eu155-> Gd155

## CAPITULO 4

**4.1- Sistema Hammer-Technion/Cinder-2**

**4.2- Bibliotecas dos Produtos de Fissão**

#### **4.1 Sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2**

Normalmente, em cálculos de reatores envolvendo o cálculo celular com queima é necessário dispor de um código que trate o problema de transmutação juntamente com o cálculo da equação de transporte de neutrons.

Neste contexto o código HAMMER-TECHNION (ver Apêndice-C) foi escolhido para efetuar o cálculo referente a equação de transporte de neutrons e o código CINDER-2 foi escolhido para servir de módulo para executar o cálculo de transmutação na célula, durante a queima do combustível, pois este código é bastante simples sob o ponto de vista de utilização e a metodologia de cálculo( Ver Apendice-A).

Os estudos e as conclusões dos dois Capítulos anteriores, Capítulos 2 e 3, servirão de suporte para a escolha das cadeias lineares a serem tratadas no problema, de maneira que serão consideradas quase todas as absorções de neutrons, tanto na região térmica quanto na região epitérmica.

No Capítulo 2 foi apresentada a teoria de transmutação, que serviu para verificar o comportamento dos produtos de fissão ao longo da queima, analisar em termos de cadeia as formas de acoplamento e a importância de determinados nuclídeos dentro de uma cadeia.

No Capítulo 3 procedeu-se à identificação dos principais nuclídeos absorvedores de neutrons por região de interesse, e fez se um novo conjunto de cadeias lineares para a biblioteca do código CINDER-2 levando em consideração estes nuclídeos identificados como os principais absorvedores.

Desta forma, para o tratamento dos produtos de fissão em termos de cálculo celular com queima será necessário gerar uma biblioteca de seções de choque destes produtos de fissão. A parte referente às bibliotecas será objeto de discussão nas seções seguintes.

A estratégia utilizada para considerar o efeito da transmutação dos produtos de fissão e os nuclídeos actínidos foi utilizar o código CINDER-2 como uma rotina do Código HAMMER-TECHNION( ver Apêndice C). Desta forma procedeu-se a um tratamento explícito dos produtos de fissão identificados como sendo os principais absorvedores. O tratamento para levar em consideração o aparecimento destes nuclídeos ao longo da queima segue fases distintas no código HAMMER-TECHNION e no código CINDER-2. A parte referente ao código CINDER-2 executa o cálculo das transmutações em termos de cadeias lineares e a parte referente ao cálculo celular é tratada pelo código HAMMER-TECHNION .

Desta forma, o código HAMMER-TECHNION executará o cálculo da equação de transporte integral para a dada célula no início de um intervalo de tempo discretizado da vida do reator, fornecendo-se assim: as concentrações iniciais, razões de fluxos e seções de choque em quatro grupos de energias para o código CINDER-2.

O código CINDER-2 efetuará os cálculos de transmutação dos actínidos e os produtos de fissão durante este intervalo de tempo discretizado, tomando as razões de fluxos constantes mais as seções de choque e, ao final do cálculo fornecerá as novas concentrações para o código HAMMER-TECHNION para o início do próximo intervalo de tempo.

O procedimento adotado para acoplar estes dois códigos, basicamente, seguiu as seguintes etapas:

a) modificar o código CINDER-2 para o cálculo com as novas cadeias;

b) montar uma biblioteca externa ao código CINDER-2 que contém as informações necessárias das cadeias lineares;

c) montar as seções de choque dos produtos de fissão em multigrupo na estrutura da biblioteca do código HAMMER-TECHNION, dos produtos de fissão considerados para o tratamento no código HAMMER-TECHNION;

d) elaborar subrotinas auxiliares no código HAMMER-TECHNION para considerar o efeito dos produtos de fissão no cálculo celular em termos seções de choque de absorção macroscópica;

e) fazer as adaptações necessárias para que o acoplamento torne-se automatizado, isto é, adequar a transferência de dados do código HAMMER-TECHNION ao CINDER-2 e vice-versa.

O item a) do procedimento de acoplamento consiste em utilizar as informações fornecidas nos Capítulos 2 e 3 e redimensionar o código CINDER-2 no aspecto computacional. Para o item b), em função das cadeias lineares elaboradas no item anterior, procede-se à montagem de uma biblioteca apropriada para as cadeias lineares a serem tratadas. Esta biblioteca é referente apenas às informações com respeito às cadeias lineares. ( ver Apêndice-B).

Com relação a esta biblioteca, a biblioteca original, consiste em seções de choque geradas pelo código NJOY/81/ e colapsada em quatro grupos de energia através do código TOAFEW/92/, que utiliza como espectro de ponderação o espectro PRS, que é um espectro característico de um reator PWR, no entanto no acoplamento esta biblioteca é utilizada

inicialmente, somente para leitura das informações a respeito das cadeias e das seções de choque. Mas antes de proceder o cálculo das transmutações as seções de choque dos nuclídeos considerados são trocadas pelas seções de choque provenientes do HAMMER-TECHNION.

Desta forma as seções de choque são colapsadas no HAMMER-TECHNION para a estrutura de quatro grupos utilizando-se o espectro de ponderação calculado no código HAMMER-TECHNION. Para os nuclídeos que constam nas cadeias lineares mas para os quais não foram geradas as seções de choque, estes utilizam as seções de choque já existentes na biblioteca original.

No item c) procede-se à geração das seções de choque dos produtos de fissão, considerados como sendo principais absorvedores na estrutura de grupo para o código HAMMER-TECHNION através do sistema NJOY. Importante observar que para certos nuclídeos não foram geradas seções de choque através do sistema NJOY, porque estes nuclídeos não se enquadravam na lista dos principais absorvedores ou não haviam dados disponíveis na biblioteca ENDF/B-V, mas no entanto estes nuclídeos são considerados devido a estrutura das cadeias lineares, das quais não foi possível eliminar este nuclídeo.

No item d) foram elaboradas quatro subrotinas auxiliares, duas delas consistem em considerar os produtos de fissão e as outras duas para cálculo das seções de choque em uma estrutura de quatro grupos para o uso no CINDER-2. Estas rotinas foram elaboradas duas a duas pois cada um faz o cálculo para uma região de energia. As rotinas referentes ao tratamento dos produtos de fissão consiste em montar as seções de choque macroscópicas por grupo na região de interesse, desta forma considera-se o efeito dos produtos de fissão no cálculo celular, esta seção de choque macroscópica é formada a partir da soma de todas as seções de choque macroscópica dos produtos de fissão. A concentração deste nuclídeo é proveniente do

cálculo efetuado no CINDER e a seção de choque proveniente da biblioteca elaborada pelo sistema NJOY, portanto estas seções de choque estão na estrutura de multigrupo do código HAMMER-TECHNION ( 30 grupos de energia na região térmica e 54 grupos na região rápida e epitérmica).

Desta forma o efeito dos produtos de fissão é considerado no cálculo celular através da soma de todos os nuclídeos considerados. Esta soma é atribuída a um nuclídeo fictício. Por outro lado, existirão os nuclídeos que não estão sendo considerados no cálculo celular pois estes não estão na biblioteca de seções de choque dos produtos de fissão, mas são tratados no cálculo de transmutação no CINDER-2.

As duas outras rotinas consistem em calcular as seções de choque colapsadas para quatro grupos utilizando o espectro de ponderação calculado pelo HAMMER-TECHNION, a fim de ser utilizado no CINDER-2, isto é, estas seções de choque são transferidas para o CINDER-2 após o cálculo no código HAMMER-TECHNION.

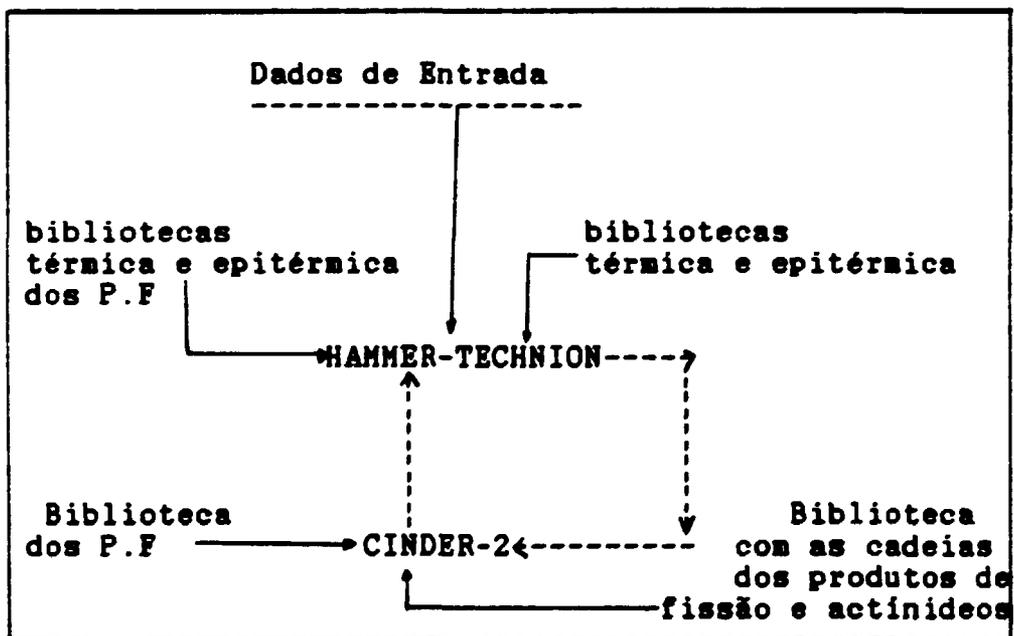
Neste sistema considera-se o efeito dos produtos de fissão pois, o espectro depende da produção dos produtos de fissão e, por sua vez, será utilizado para o cálculo das seções de choque considerando se o efeito do aparecimento dos produtos de fissão.

Importante observar que este procedimento é adotado também para os nuclídeos actínídeos, isto é as seções de choque dos nuclídeos actínídeos também são trocadas, pois o CINDER calculará a transmutação não só dos produtos de fissão como também dos nuclídeos actínídeos relevantes ao problema, e as novas concentrações também serão calculadas.

Finalmente o último item consiste em identificar as variáveis necessárias para o cálculo automático entre os códigos HAMMER-TECHNION e o CINDER-2.

Este sistema pode, então, executar o cálculo celular considerando-se a queima do combustível e o efeito do aparecimento dos produtos de fissão e os nuclídeos actínideos ao longo da queima.

O diagrama abaixo descreve a forma de acoplamento entre estes dois códigos:



Esquemáticamente, para um dado intervalo de tempo o HAMMER-TECHNION efetua o cálculo celular no início deste intervalo fornecendo os dados necessários ao CINDER-2 (Fluxo em quatro grupos e as seções de choque dos actínideos e dos produtos de fissão em quatro grupos), o CINDER, com os dados fornecidos pelo HAMMER-TECHNION, executa o cálculo de transmutação no intervalo de tempo fornecendo as novas concentrações para o final deste intervalo para o HAMMER-

TECHNION, este processo é executado repetidas vezes para um dado número de intervalos de tempo .

#### 4.2 Biblioteca dos Produtos de Fissão

Neste sistema, HAMMER-TECHNION/CINDER-2, a parte referente ao tratamento dos produtos de fissão contará com três bibliotecas. Uma biblioteca é referente às cadeias lineares com as respectivas informações das mesmas, enquanto que as demais são bibliotecas com seções de choque em 30 grupos e 54 grupos de energia, respectivamente para a região térmica e região epitérmica/rápida.

As bibliotecas de seções de choque como já foi mencionado anteriormente, foram montadas para atender ao tratamento dos produtos de fissão a nível de cálculo celular com queima, desta forma esta biblioteca contém 85 nuclídeos

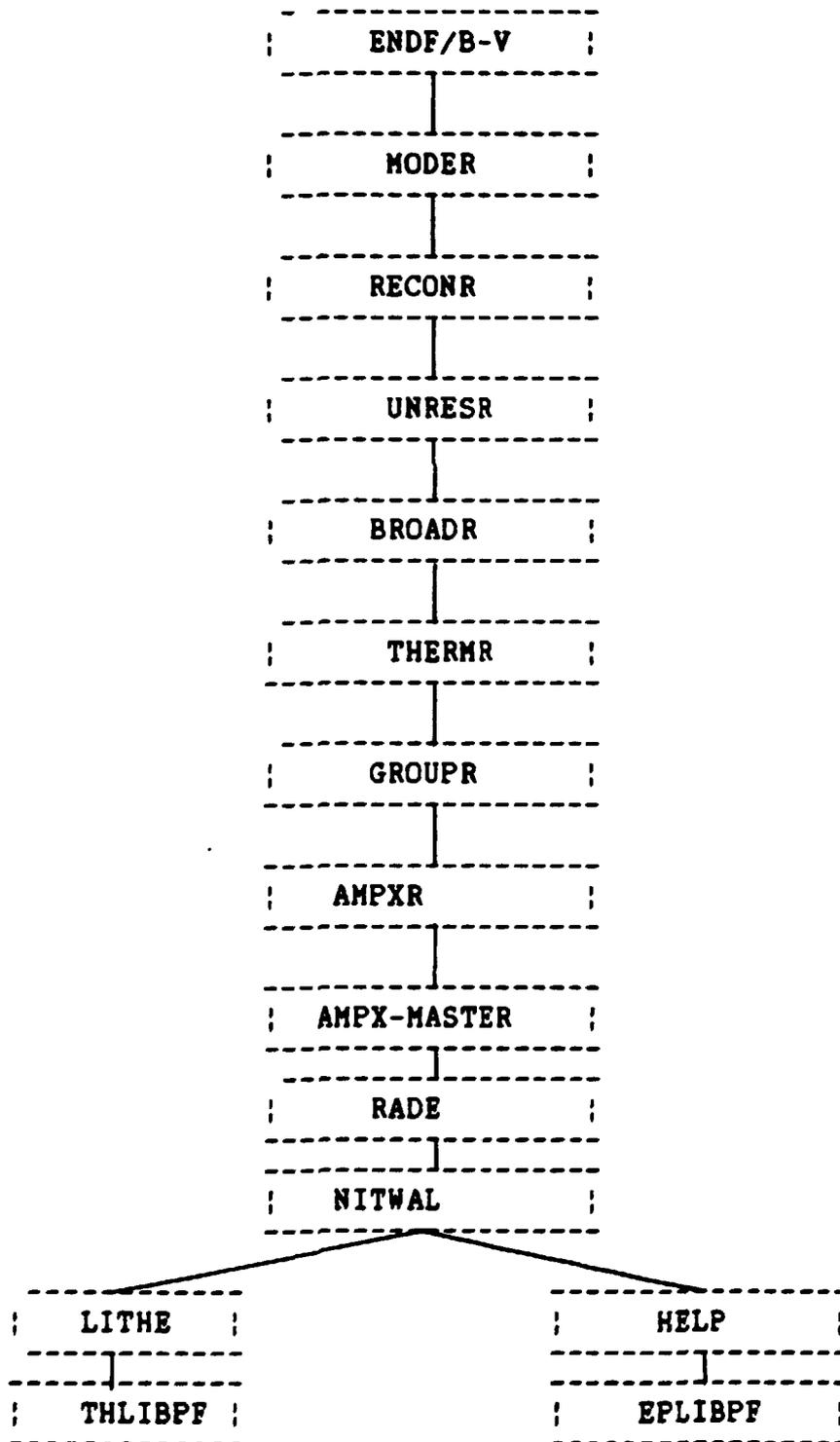
Quanto à outra biblioteca, que serve para transferir as informações necessárias quanto às cadeias ,tanto dos produtos de fissão, quanto dos nuclídeos actínideos, conta com 32 nuclídeos actínideos em 38 cadeias lineares e 85 produtos de fissão em 51 cadeias lineares. Esta biblioteca é utilizada inicialmente para alimentar dados referentes as cadeias lineares tais como o conjunto de "yields", constantes de decaimento, formas de acoplamentos entre os nuclídeos e as seções de choque em quatro grupos para reações de captura, mas é importante observar novamente que as seções de choque que se encontram nesta biblioteca não serão utilizadas. As seções de choque em quatro grupos utilizados são provenientes do código HAMMER-TECHNION através do acoplamento.

Com relação às bibliotecas de seção de choque ,térmica e epitérmica/rápida, estas servem para gerar as seções de choque

macroscópica e fornecer as seções de choque colapsadas de cada nuclídeo ao CINDER-2.

A elaboração das bibliotecas térmicas e epitérmicas dos produtos de fissão segue um procedimento diferente daquele (via ETOG/4/ e FLANGE/48/) utilizado para a geração da biblioteca do HAMMER-TECHNION .

Esquemáticamente o fluxograma abaixo mostra as etapas utilizadas para a geração das bibliotecas térmicas e epitérmica/rápida dos produtos de fissão no sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2.



O processamento inicia-se com o arquivo de dados nucleares ENDF/B-V referentes aos produtos de fissão através do sistema NJOY/60/. Na primeira parte, denominada pré-processamento, são executados os módulos RECONR, BROADR, UNRESR e THERMR, nesta fase, com exceção do parâmetro temperatura utilizado no alargamento Doppler e nas matrizes de espalhamento térmico, todos os dados nucleares são independentes do problema. Descrevendo brevemente os módulos do sistema NJOY temos:

-MODER :tem a incumbência de transformar um arquivo ENDF formatado para binário e vice-versa.

-RECONR :reconstrói as seções de choque numa forma pontual a partir dos parâmetros de ressonância e das leis de interpolação da ENDF/B e escreve o arquivo final denominado PENDF (Pointwise Evaluated Nuclear Data File) de tal forma que as seções de choque sejam linearmente interpoláveis dentro de uma precisão pré-fixada.

-BROADR :lê o arquivo PENDF gerado pelo módulo RECONR e elabora o alargamento Doppler de todas as reações dos núcleos desejados deste arquivo na temperatura desejada. O arquivo final é escrito num único "grid" de energia, numa forma linearmente interpolável dentro de uma precisão pré-fixada;

-UNRESR :produz as seções de choque efetivas na região de ressonâncias não resolvidas. Os dados finais são escritos numa forma tabular.

-THERMR :produz as seções de choque e as matrizes de espalhamento na região de energia térmica dos neutrons . Este módulo do sistema NJOY utiliza as leis de espalhamento térmico  $S(\alpha, \beta)$  /52/, para os neutrons que possuem estes dados, exemplos destes materiais é o hidrogênio ligado à molécula de água ou o carbono na grafita. Os dados finais

também se encontram numa forma linearmente interpolável para uma precisão pré-fixada e são adicionadas no arquivo PENDF.

Até o módulo THERMR, os dados nucleares produzidos são independentes da aplicação. O único parâmetro que restringe o uso destes dados nucleares é a temperatura utilizada no alargamento Doppler e a temperatura utilizada na matriz de espalhamento térmico. A temperatura utilizada na geração das bibliotecas dos produtos de fissão foi de 300 K.

-GROUPT :processa as seções de choque pontuais em parâmetro de multigrupo utilizando o método de Bondarenko . Neste ponto o elo de ligação entre os dados nucleares independentes da aplicação e os dados nucleares para a aplicação específica é introduzido através da estrutura de multigrupo e do espectro de ponderação. Neste ponto são produzidas as seções de choque para a aplicação específica.

-AMPXR- foi escrito especialmente no IPEN/CNEN-SP /76/, como sendo um módulo do sistema NJOY para transformar os dados nucleares de multigrupo calculados com o módulo GROUPT num formato compatível com a biblioteca MASTER do sistema AMPX-II .

- RADE :verifica a consistência da formatação efetuada pelo módulo AMPXR. A importância deste módulo é a verificação da formatação da biblioteca MASTER do sistema AMPX-II , as consistências verificadas são se a seção de choque total é a soma das partes e se as matrizes de espalhamento são convenientemente normalizadas para os processos nucleares unidimensionais correspondentes.

-NITWAL - transforma a biblioteca MASTER num formato compatível com a biblioteca WORKING para a utilização posterior.

A saída do NITAWL fornece dois arquivos que serão os dados de entrada do LITHE e HELP para constituírem as bibliotecas térmicas e epitérmicas respectivamente ,para o código HAMMER-TECHNION.

O programa LITHE/13/, sofreu alterações para atender as necessidades do problema. A primeira modificação efetuada ao programa LITHE foi converter a matriz de transferência para unidades de energia pois o LITHE resolve normalmente esta matriz em termos de unidades de velocidade. Para este objetivo foi efetuada a seguinte transformação na matriz de transferência calculada pelo módulo GROUPE do sistema NJOY e colocada num formato compatível da biblioteca Master pelo programa AMPXR:

$$P'(v_i < -v_j) = \sigma_{g_j \rightarrow g_i} / \Delta E_{g_j}$$

onde i,j, referem-se aos grupos de velocidades,  $v_i$  e  $v_j$  e  $g_{ij}$  denota o correspondente grupo de energia. A transformação acima foi feita até a primeira ordem de espalhamento (P1).

A Única modificação implementada no LITHE consistiu em ajustar o programa para acomodar a matriz de espalhamento calculada pelo módulo GROUPE do sistema NJOY, pois a versão original desse programa LITHE requer que a matriz de espalhamento seja triangular inferior, ou seja, somente são exigidos termos de "downscattering" . O "upscattering" é calculado nesse programa através do uso do balanço detalhado. Entretanto os dados produzidos pelo módulo GROUPE são matricialmente completos, ou seja, contém todos os modos possíveis de "downscattering" e "upscattering".

O programa HELP/13/ não sofreu alteração para elaboração da biblioteca final para o código HAMMER-TECHNION.

Uma outra particularidade nesta biblioteca dos produtos de fissão são as seções de choque dos nuclídeos Gd155 e Gd157, que foram processados de forma diferente a estrutura acima.

Os nuclídeos Gd155 e Gd157 já constavam na biblioteca de materiais do código HAMMER-TECHNION mas, como o propósito era gerar uma biblioteca somente com as seções de choque dos produtos de fissão, desta forma fez-se necessário colocar estes dois nuclídeos na biblioteca dos produtos de fissão.

A Tabela abaixo relaciona os nuclídeos para qual foram geradas as seções de choque:

**Tabela 4.1 Nuclídeos constituintes da biblioteca dos produtos de fissão:**

**NUCLÍDEOS NA BIBLIOTECA DOS PRODUTOS DE FISSÃO**

<b>NUCLÍDEO</b>	<b>IDENTIFICAÇÃO</b>	<b>ARQUIVO</b>
Br 81	35081	ENDF/B-V
Kr 82	36082	ENDF/B-V
Kr 83	36083	ENDF/B-V
Kr 84	36084	ENDF/B-V
Sr 90	38090	ENDF/B-V
Y 89	39089	ENDF/B-V
Y 90	39090	ENDF/B-V
Zr 93	40093	ENDF/B-V
Zr 95	40095	ENDF/B-V
Nb 95	41095	ENDF/B-V
Mo 95	42095	ENDF/B-V
Mo 97	42097	ENDF/B-V
Mo 98	42098	ENDF/B-V
Mo 99	42099	ENDF/B-V
Mo100	42100	ENDF/B-V
Tc 99	43099	ENDF/B-V
Ru100	44100	ENDF/B-V
Ru101	44101	ENDF/B-V
Ru102	44102	ENDF/B-V
Ru103	44103	ENDF/B-V
Ru104	44104	ENDF/B-V
Ru105	44105	ENDF/B-V
Ru106	44106	ENDF/B-V
Rh103	45103	ENDF/B-V
Rh105	45105	ENDF/B-V
Pd104	46104	ENDF/B-V
Pd105	46105	ENDF/B-V
Pd106	46106	ENDF/B-V
Pd107	46107	ENDF/B-V
Pd108	46108	ENDF/B-V
Ag109	47109	ENDF/B-V
Cd110	48110	ENDF/B-V
Cd111	48111	ENDF/B-V
Cd113	48113	ENDF/B-V
In115	49115	ENDF/B-V
I 127	53127	ENDF/B-V
I 129	53129	ENDF/B-V
I 131	53131	ENDF/B-V
I 135	53135	ENDF/B-V
Xe131	54131	ENDF/B-V
Xe132	54132	ENDF/B-V
Xe133	54133	ENDF/B-V
Xe134	54134	ENDF/B-V
Xe135	54135	ENDF/B-V

## NUCLIDEOS NA BIBLIOTECA DOS PRODUTOS DE FISSAO

Xe136	54136	ENDF/B-V
Cs133	55133	ENDF/B-V
Cs134	55134	ENDF/B-V
Cs135	55135	ENDF/B-V
Ba137	56137	ENDF/B-V
La139	57139	ENDF/B-V
Ce140	58140	ENDF/B-V
Ce141	58141	ENDF/B-V
Ce142	58142	ENDF/B-V
Ce143	58143	ENDF/B-V
Ce144	58144	ENDF/B-V
Pr141	59141	ENDF/B-V
Pr142	59142	ENDF/B-V
Pr143	59143	ENDF/B-V
Nd142	60142	ENDF/B-V
Nd143	60143	ENDF/B-V
Nd144	60144	ENDF/B-V
Nd145	60145	ENDF/B-V
Nd146	60146	ENDF/B-V
Nd147	60147	ENDF/B-V
Nd150	60150	ENDF/B-V
Pm147	61147	ENDF/B-V
Pm148	61148	ENDF/B-V
Pm148M	61148	ENDF/B-V
Pm149	61149	ENDF/B-V
Pm151	61151	ENDF/B-V
Sm147	62147	ENDF/B-V
Sm148	62148	ENDF/B-V
Sm149	62149	ENDF/B-V
Sm150	62150	ENDF/B-V
Sm151	62151	ENDF/B-V
Sm152	62152	ENDF/B-V
Sm153	62153	ENDF/B-V
Sm154	62154	ENDF/B-V
Eu153	63153	ENDF/B-V
Eu154	63154	ENDF/B-V
Eu155	63155	ENDF/B-V
Eu156	63156	ENDF/B-V
Gd155	64155	ENDF/B-IV
Gd157	64157	ENDF/B-IV

## CAPITULO 5

5.1 - Introdução

5.2 - Benchmark numérico

5.3 - Barns por fissão calculado versus experimental

## 5.1 Introdução

A fim de validar a metodologia do problema ,( implementar um módulo de tratamento dos produtos de fissão em cálculo celular), foram escolhidos dois problemas para verificar o desempenho da metodologia apresentada: um numérico e um experimental.

O problema numérico consiste em comparar o valor de  $K$ -infinito calculado por outros códigos e o problema experimental consiste em calcular a grandeza barns por fissão para 2200m/s. Com relação ao problema experimental foi escolhido apenas um experimento devido à escassez de experiências que verifiquem a quantidade barns por fissão. Neste contexto observa-se através da literatura a respeito dos produtos de fissão que basicamente existem apenas duas experiências disponíveis a respeito de barns por fissão/43,66/.

Dentro destas limitações escolheu-se apenas um experimento para verificar a grandeza barns por fissão.

## 5.2 Benchmark Numérico

Para avaliar a metodologia de cálculo procurou-se resolver o problema padrão publicado no IAEA-TECDOC 233/70/.

Este problema consiste na avaliação de parâmetros neutrônicos tais como: fator de multiplicação, variação de reatividade, razões de fluxos, etc, de um reator típico de pesquisa de 10MW com vários enriquecimentos (20%, 45%, 93%).

Na referência /71/ encontram-se os resultados obtidos de sete grupos internacionais ( ANL-EUA, INTERATOM-RFA, EIE - Suíça, OSGAE - Austria; CEA- França, JAERI - Japão, CNEA - Argentina).

Este problema representa um bom parâmetro de comparação, pois os centros internacionais citados acima fizeram seus cálculos baseados em vários códigos e o problema abrange uma faixa de enriquecimento bastante variável. Na referência /71/ constam os dados necessários para a reprodução do problema executado.

As figuras a seguir ilustram o comportamento do parâmetro K-infinito obtido através de vários códigos do mesmo problema padrão para três enriquecimentos( 20%, 45%, 93%)

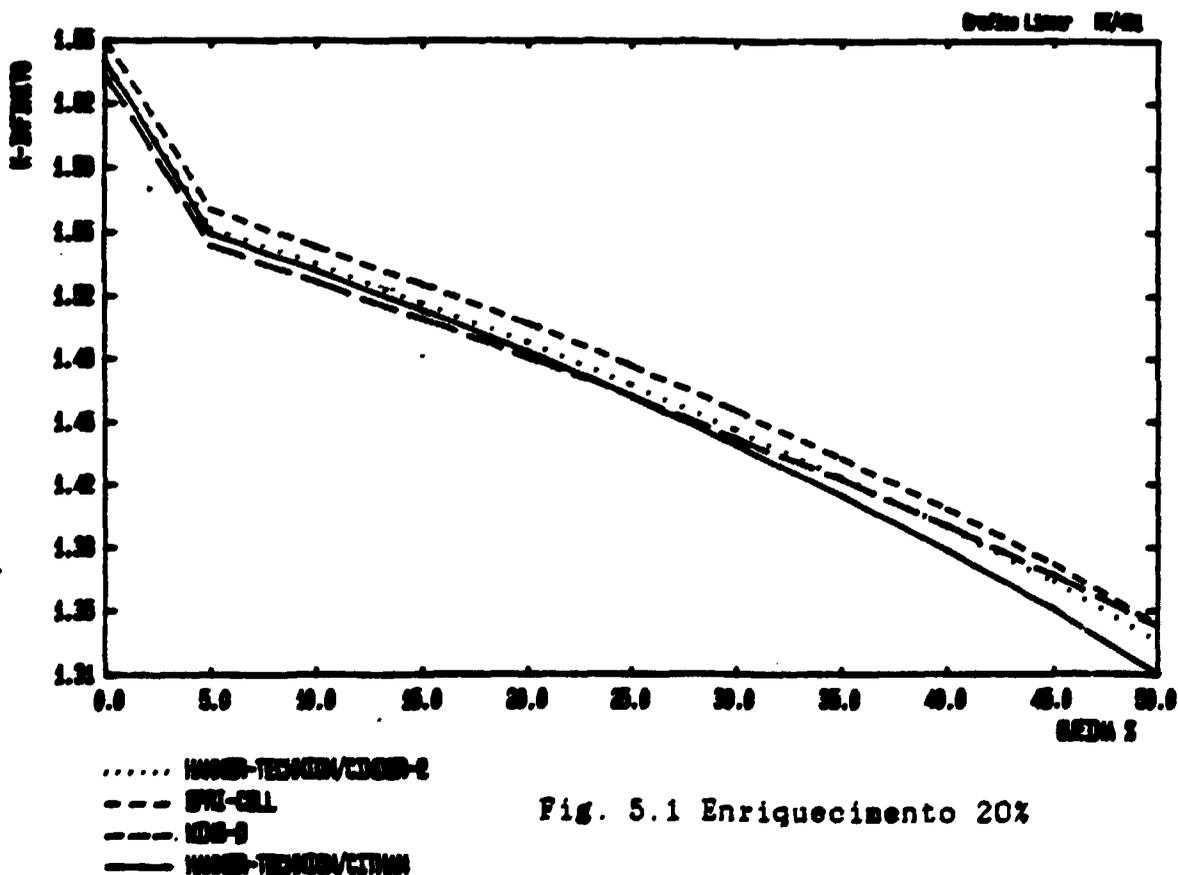


Fig. 5.1 Enriquecimento 20%

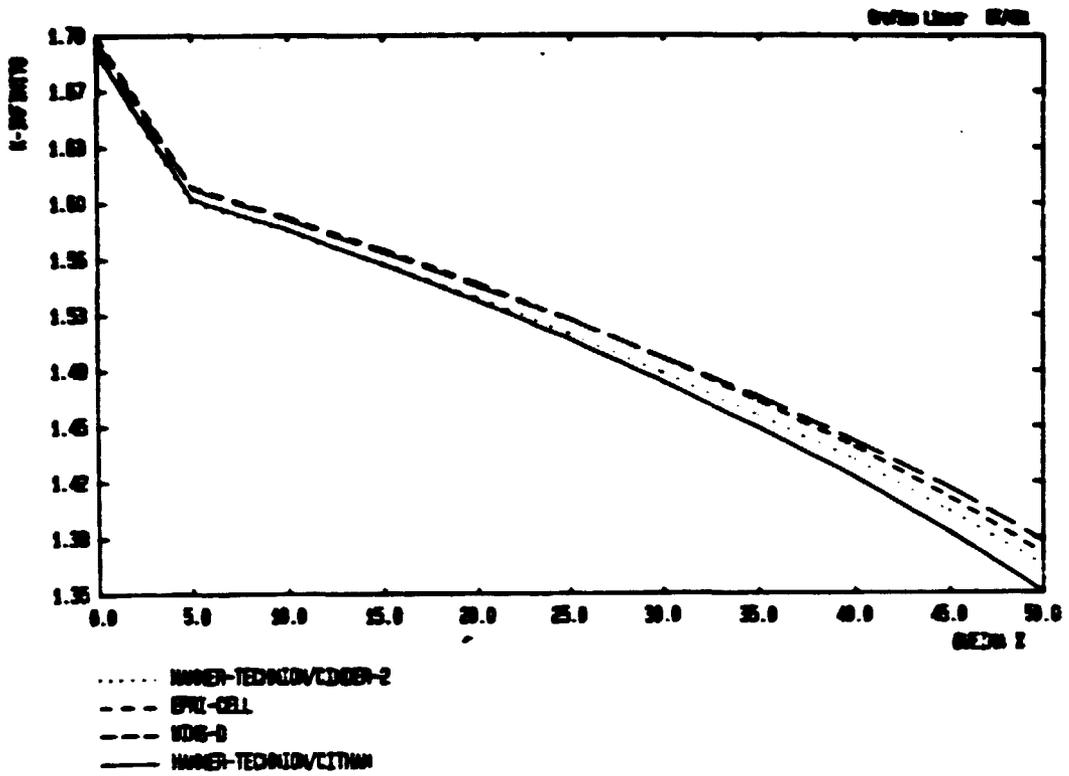


Fig. 5.2 Enriquecimiento 45%

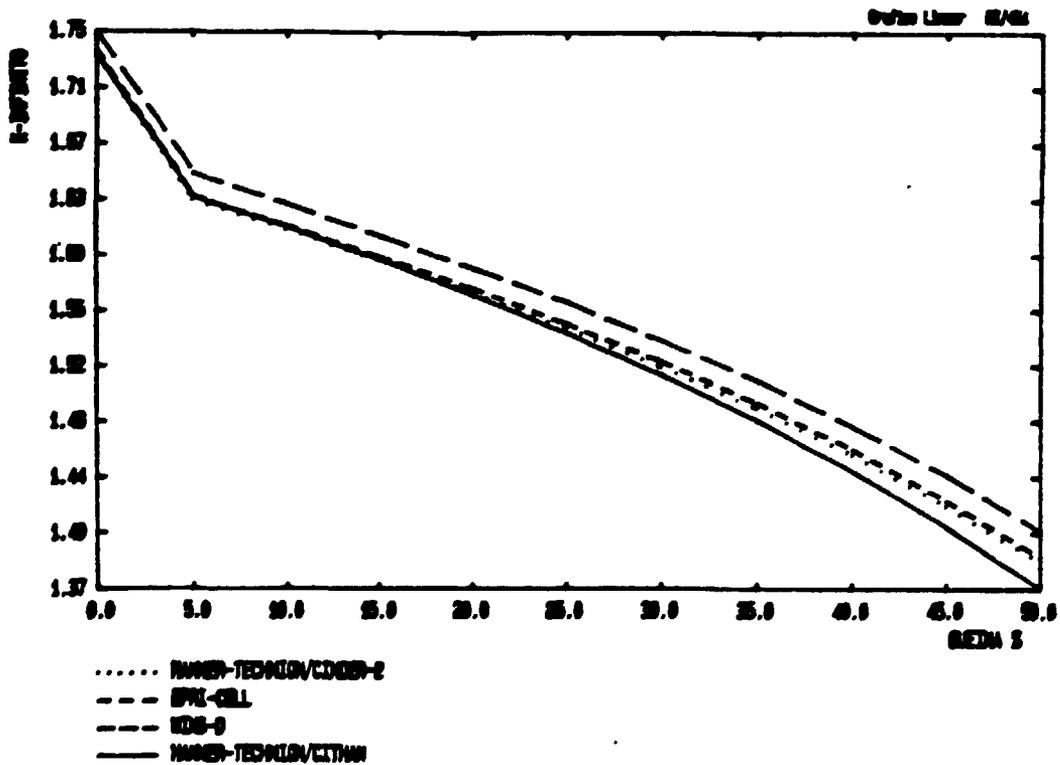


Fig. 5.3 Enriquecimiento 93%

Com relação às Figuras 5.1, 5.2 e 5.3 observa-se a consistência dos resultados obtidos quando comparados com vários códigos (EPRI-CELL, WIMS-D, HAMMER-TECHNION/CITHAM), onde todos utilizam bibliotecas de dados diferentes e tem estruturas diferentes, neste sentido somente é possível fazer observações comparativas. Desta forma, este problema consiste apenas em um exercício numérico para avaliar a concordância do valor de  $K$ -infinito obtido através do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2, quando comparado com os demais códigos para o mesmo problema.

Apesar de consistir em um exercício numérico, observa-se que os valores de  $K$ -infinitos comparado com os demais códigos fornecem resultados bastante satisfatórios, pois as curvas obtidas através do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 sempre se encontram entre as demais curvas para os três enriquecimentos.

Importante observar que a curva obtida através do sistema HAMMER-TECHNION/CITHAM tem sempre o valor inferior às demais curvas para altas queimas. Com relação às curvas obtidas através do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 observa-se que estes têm o valor sempre inferior às curvas do EPRI-CELL, sendo que a maior diferença está para o problema com enriquecimento de 20% (Figura 5.1.) e a menor diferença no problema com enriquecimento de 93% (Figura 5.3.) , além disso a curva obtida através do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 é muito próxima da curva obtida através do código HAMMER-TECHNION/CITHAM para queimas baixas, sendo que basicamente a única diferença entre o sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 e o código HAMMER-TECHNION/CITHAM reside no tratamento dos produtos de fissão.

### 5.3 Barns por Fissão Calculado Versus Experimental

A segunda parte da validação da metodologia consiste em comparar a grandeza barns por fissão para 2200m/s, pois esta

grandeza mostra o efeito devido a absorção de neutrons térmicos pelos produtos de fissão. Para tal escolheu-se o experimento : "Redetermination of Thermal Neutron Absorption Cross-Section of Gross Fission Products of U233, U235 and Pu239",/66/.

Esta experiência consiste numa redeterminação do experimento anterior/65/, que por motivos de erros sistemáticos ocasionaram discrepâncias nos resultados medidos.

A experiência tem por objetivo quantificar a absorção de neutrons devido aos produtos de fissão através da avaliação da diferença de reatividade das amostras, obtendo se assim a grandeza barns por fissão para 2200 m/s.

Para tal, prepara-se um conjunto de amostras de U233, U235 e Pu239 quase puros em forma de liga com alumínio e em seguida, estas amostras são colocadas para serem irradiados a um tempo variável dentro do reator canadense NRU.

As amostras são cilíndricas com material combustível em forma de liga de alumínio com encamisamento de alumínio .

A figura abaixo mostra as dimensões da amostra exemplo:

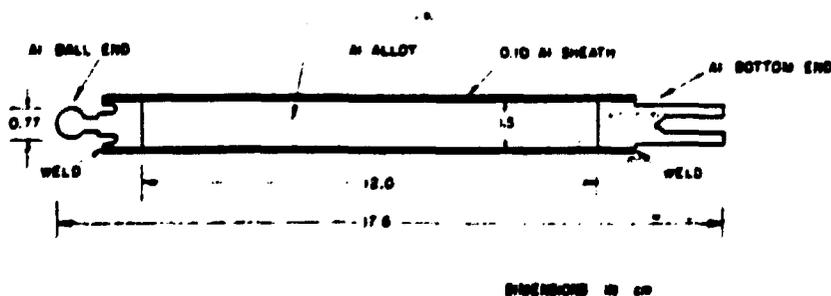


Fig. 5.4 Dimensões da Amostra Utilizada para Irradiação

Estas amostras são colocadas para serem irradiadas no reator NRU, um reator moderado a água pesada, numa fluência aproximada de 2.5 n/Kb, variando de uma amostra para outra.

Nas tabelas abaixo constam as composições dos nuclídeos nas várias amostras.

Tabela 5.1. Composição isotópica da amostra de U233

Amostra	A3B
Concentração inicial em átomos %	U233 = 99.787 +- 0.004 U234 = 0.0530 +- 0.002 U238 = 0.1600 +- 0.003
Massa de U233 em mg	1434 +- 3
Número de átomos(10 <sup>21</sup> )	U233 = 3.706 +- 0.008 U234 = 0.00196 +- 0.00007 U238 = 0.00593 +- 0.00011
Massa de alumínio(g)	liga = 56.716 encamissamento = 33.332

Tabela 5.2. Composição isotópica da amostra de U233

Amostra	A3F
Concentração inicial em átomos %	U233 = 99.787 +- 0.004 U234 = 0.0580 +- 0.002 U238 = 0.1600 +- 0.002
Massa de U233 em Mg	1433 +- 3
Número de Átomos(10 <sup>21</sup> )	U233 = 3.704 +- 0.008 U234 = 0.00196 +- 0.00007 U238 = 0.00593 +- 0.00011
Massa de Alumínio (g)	liga = 56.817 encamissamento = 33.30

Tabela 5.3. Composição isotópica da amostra de U235

I Amostra	I	A5B	I
I Concentração	I U234 =	0.061 +- 0.002	I
I inicial em	I U235 =	99.746 +- 0.003	I
I Atomos %	I U236 =	0.066 +- 0.001	I
I	I U238 =	0.127 +- 0.001	I
I Massa de U235	I		I
I em Mg	I	1569 +- 2	I
I	I		I
I Numeros	I U234 =	0.00245 +-0.00008	I
I de	I U235 =	4.01000 +-0.00500	I
I Atomos(10 <sup>21</sup> )	I U236 =	0.00265 +-0.00008	I
I	I U238 =	0.00509 +-0.00004	I
I Massa de	I liga =	56.781	I
I Alumínio (g)	I encamisamento =	33.575	I

Tabela 5.4. Composição isotópica da amostra de U235

I Amostra	I	A5F	I
I Concentração	I U234 =	0.061 +- 0.002	I
I inicial em	I U235 =	99.746 +- 0.003	I
I Atomos %	I U236 =	0.0660 +- 0.002	I
I	I U238 =	0.1270 +- 0.002	I
I Massa de U235	I		I
I em Mg	I	1561 +- 2	I
I	I		I
I Numeros	I U234 =	0.00243 +- 0.00008	I
I de	I U235 =	3.99000 +- 0.00500	I
I Atomos(10 <sup>21</sup> )	I U236 =	0.00262 +- 0.00008	I
I	I U238 =	0.00507 +- 0.00004	I
I Massa de	I liga =	56.539	I
I Alumínio (g)	I encamisamento =	32.91	I

Tabela 5.5. Composição isotópica da amostra de Pu238

I Amostra	I	A9A	I
I Concentração	I Pu239 =	98.150 +- 0.005	I
I em	I Pu240 =	1.797 +- 0.005	I
I Atomos %	I Pu241 =	0.053 +- 0.001	I
I Massa de Pu239	I		I
I em (Mg)	I	949.5 +- 8	I
I	I		I
I Numero	I Pu239 =	2.349 +- 0.020	I
I de	I Pu240 =	0.0430 +- 0.0004	I
I Atomo (10 <sup>21</sup> )	I Pu241 =	0.00127+- 0.00003	I
I Massa de	I liga =	56.751	I
I Aluminio (g)	I encamisamento =	34.92	I

Tabela 5.6. Composição isotópica da amostra do Pu239

I Amostra	I	A9D	I
I Concentração	I Pu239 =	98.150 +- 0.005	I
I inicial	I Pu240 =	1.797 +- 0.005	I
I em átomos %	I Pu241 =	0.053 +- 0.001	I
I Massa de Pu239	I		I
I em Mg	I	951.7 +- 8	I
I	I		I
I Numero	I Pu239 =	2.351 +- 0.020	I
I de	I Pu240 =	0.0431 +- 0.0004	I
I Atomos(10 <sup>21</sup> )	I Pu241 =	0.00127+- 0.00003	I
I Massa de	I liga =	56.848	I
I Aluminio (g)	I encamisamento =	34.19	I

Estas amostras são submetidas à irradiação e, em seguida, procede-se a parte mais importante da experiência que consiste em medir a reatividade da amostra.

Esta medida é feita através da técnica denominada "pile oscillator". Para proceder a esta medida as amostras irradiadas são colocadas no reator RO moderado a água pesada, que dispõe de aparelhagem para tomar as medidas.

Após a medida da reatividade da amostra irradiada esta é removida do local e passa por um tratamento químico e medida de espectroscopia de massa, a fim de determinar a quantidade do material fissil remanescente. Determinada esta é efetuado o cálculo de reatividade devido a esta quantidade e subtraída da reatividade total medida da amostra.

Esta diferença de reatividade será atribuída aos produtos de fissão. Através de uma expressão da reatividade da teoria de perturbação /8/ em função da seção de choque dos produtos de fissão determina-se a seção de choque responsável por esta variação na reatividade.

Para obter sucesso na experiência é necessário conhecer todos os parâmetros do reator e ter uma amostra bastante irradiada, pois desta forma a quantidade de material fissil será reduzida. Os detalhes desta experiência não serão relatados neste trabalho, pois trata-se de um experimento bastante sofisticado e não se enquadra no escopo do trabalho, mas os maiores detalhes podem ser encontrados na Referência/66/.

A Referência /66/ mostra os resultados experimentais obtidos e resultados obtidos através do cálculo com o código FISSPROD/57,85/.

Para obter a grandeza barns por fissão para 2200m/s no sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 procedeu-se as seguintes etapas em linhas gerais:

A) Montagem das células unitárias através das concentrações dadas pelas Tabelas (5.1-5.6) e dimensões especificadas na Figura 1. Esta fase consiste em preparar os dados de entrada necessários para a execução do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2. A modelagem da célula unitária consistiu em reproduzir uma célula cilíndrica com região de combustível, encamisamento e moderador.

B) A partir dos dados montados das células unitárias procedeu-se à execução do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 para um determinado número de intervalos de tempo com queima, seguido de um outro conjunto de intervalos de tempo, considerando o decaimento.

Com relação ao intervalo de tempo adotado para a queima foi ajustado pela quantidade fluxo térmico pois a fluência e o fluxo de neutrons na qual a amostra foi irradiada são dados conhecidos no problema.

Outra quantidade ajustada foi a queima da amostra através do fluxo térmico, pois estas amostras têm uma determinada queima, esta é determinada através da quantidade de átomos físseis restantes na amostra após a queima. Assim para o cálculo da queima ajustou-se o fluxo mantendo-se o tempo de irradiação fixo de maneira que reproduzisse a queima da amostra(U233,U235,Pu239).

É importante observar que o primeiro ajuste fornece o intervalo de tempo no qual a amostra será irradiada e o outro ajuste consite em uma manipulação do fluxo para atingir a

queima desejada, poder-se-ia também obter a queima desejada manipulando o intervalo de tempo .

O cálculo das amostras com queima e com decaimento é necessário, pois as amostras são colocadas para serem resfriados por um determinado tempo antes de proceder a tomada das medidas.

Nesta execução do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 para cada amostra obteve-se uma biblioteca de seções de choque em quatro grupos de energia para os nuclídeos actínideos e os produtos de fissão , espectro e as razões de fluxo para cada intervalo de tempo, inclusive no intervalo de decaimento.

C) A próxima fase consistiu em executar o código CINDER-2 na sua forma original com o mesmo número de intervalos de tempo com queima e com decaimento, utilizando-se os dados obtidos na fase B).

O motivo de ter sido executado o código CINDER-2 na sua forma original para obter a grandeza barns por fissão é justificada, pois o código CINDER-2, na sua forma original trata de todos os produtos de fissão, enquanto que o CINDER-2 utilizado no acoplamento com o código HAMMER-TECHNION trata o problema de transmutação com cadeias reduzidas elaboradas no Capítulo anterior.

Nesta cadeia reduzida o número de produtos de fissão é inferior ao da cadeia original e certos nuclídeos não são considerados no acoplamento HAMMER-TECHNION/CINDER-2, de forma que estes nuclídeos não têm seções de choque.

Nesta execução obteve-se a grandeza barns por fissão para cada intervalo de tempo e para determinar o valor de barns por fissão para 2200m/s, tomou-se a grandeza barns por fissão calculada do grupo térmico do último intervalo de tempo e

dividiu-se pelo espectro correspondente , obtendo-se a grandeza barns por fissão para 2200m/s da amostra em questão, tal procedimento é utilizado na Referência /88/.Este espectro corresponde à seção de choque de um absorvedor com comportamento  $1/v$  normalizado para 2200m/s no espectro maxwelliano.

Desta forma obtém-se a grandeza barns por fissão onde são considerados todos os produtos de fissão presentes na biblioteca original do código CINDER-2.

Os resultados obtidos para as seis amostras com o sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 , os valores calculados pelo FISSPROD, medidos da referência/86/ e valores da razão entre o valores calculados e medidos encontram-se nas tabelas abaixo:

Tabela 5.7. Valores das razões (calculados/medidos) obtidas através do sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 , FISSPROD e valores medidos

BARNES POR FISSAO			
Amostra	Calculado/Medido	Medido	
	HAM-CINDER-2	FISSPROD	
A3B	1.0111	1.05	41.9 +- 2.5
A3F	1.0340	1.10	38.9 +- 1.8
A5B	1.0156	1.07	48.7 +- 2.2
A5B	1.0075	1.08	46.5 +- 1.6
A9A	0.87475	1.07	62.3 +- 3.3
A9D	0.80473	0.96	71.1 +- 3.8

Tabela 5.8. Valores percentuais de queima obtido pelo sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 e da Referência/66/.

Amostra	Queima %	
	Ham-Tech/Cinder	Referência
A3B	71.37	71.88
A3F	79.097	79.022
A5B	71.32	71.47
A5F	77.38	77.41
A9A	93.58	93.60
A9D	89.52	89.51

Nesta parte da validação, observou-se que os valores calculados de barns por fissão para 2200 m/s estão dentro dos erros experimentais para as amostras de U233 e U235. Observando-se que a amostra de U235 (A5B) apresentou o menor desvio (0.7%) e o maior desvio encontrado foi na amostra de U233 (A3F) com desvio de 3.4% quando comparado o valor experimental (Tabela 5.7.).

Na amostra de U233 (A3B e A3F) observa-se que a amostra mais queimada (A3F) apresenta o maior desvio enquanto a amostra de menor queima apresenta o menor desvio segundo as Tabelas 5.7. e 5.8., este comportamento é inverso na amostra de U235 (A5B e A5F), mas segundo a Tabela 5.7. observa-se que os erros experimentais são menores para a amostra mais irradiada de U233 e U235.

A queima é importante neste problema, pois segundo a Referência /65/, quanto mais queimada a amostra menos nuclídeos actinídeos conterà no sistema desta forma minimiza-se o erro na

determinação da concentração dos nuclídeos actídeos remanescentes na amostra.

Ainda com relação as amostras de U233 e U235 temos que os valores calculados são sempre superiores ao valor medido e o comportamento da grandeza barns por fissão para 2200m/s diminui da amostra menos irradiada para amostra mais irradiada.

As amostras de Pu239 (A9A , A9D) são as que apresentaram os resultados mais discrepantes quando comparados com os valores experimentais.

Observou-se que para a amostra A9D obteve-se a maior diferença percentual ( 19.53%) entre o valor medido e o calculado e para a amostra A9A esta diferença é de aproximadamente 12.52%.

Com relação à queima (Tabela 5.8.) tem-se que o desvio com relação ao valor da referência é menor que 1%, e ainda é verificada a tendência do valor de barns por fissão ser maior para a amostra menos irradiada (A9D) e para a amostra mais irradiada (A9A) o valor de barns por fissão para 2200m/s ser maior (Tabela 5.7.)

Em função das discrepâncias encontradas no caso do Pu239 observou-se:

1) A razão entre o valor calculado pelo sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 e medido das amostras de (U233, U235) mostraram que o valor calculado é sempre superior ao valor medido, ocorrendo o inverso para a amostra de Pu239 (Tabela 5.8.).

2) A diferença de queima entre as amostras de Pu239 (A9A) e (A9D) é a menor com relação às demais diferenças de queima, mas tem-se a maior diferença no valor de barns por fissão.

Baseado no valor medido, tentou-se localizar os eventuais fatores que poderiam ter contribuído para a discrepância no cálculo.

Os fatores analisados são:

a) número total de fissões, fissão do nuclídeo Pu239 e fissão do nuclídeo Pu241.

b) seções de choque dos actínídeos presentes

c) seções de choque dos produtos de fissão

No item a), relativamente ao número total de fissões tem-se que a diferença entre o número de fissões da referência e do cálculo obtido do código Cinder-2 na sua forma original, difere de apenas 1.4%, sendo que o número total de fissões calculado é maior. Para as fissões no nuclídeo Pu239 a diferença é da ordem de 2% entre o valor da referência e o calculado e para as fissões no nuclídeo Pu241 a diferença é da ordem de 40%, observando que no código Cinder-2 obteve 40% menos fissões que o valor da referência.

No item b) observou-se que as seções de choque dos actínídeos utilizadas pela referência e as seções de utilizadas pelo código Cinder-2 diferem de apenas 1%.

No item c) para as seções de choque dos produtos de fissão, foi possível comparar apenas as seções de choque de absorção utilizadas pelo Fissprod e pelo Cinder-2, nesta comparação foram constatadas poucas diferenças no valor de seções de choque efetivas, ressaltando que a maior diferença foi verificada nos nuclídeos Pm147, Pm148, Pm148M, Pm151, Eu154, Eu155 e Eu156.

A tabela abaixo ilustra as seções de choque utilizadas pelo Cinder-2 e Fissprod.

Tabela 5.9. Seções de choque utilizadas pelo Fissprod e Cinder-2

Nuclídeo	seções de choque térmica efetivas	
	Cinder-2	Fissprod
Pm147	181.492	90.0
Pm148	2035.65	3000.00
Pm148M	16227.6	24000.00
Pm151	701.843	400.00
Eu154	1327.42	1500.00
Eu155	41050.44	13000.00
Eu156	483.525	2000.00

A partir dos fatores analisados não podemos inferir quais fatores afetaram o resultado, pois com relação ao número total de fissões, observou-se que existe uma diferença da ordem de 1%, assim como a grandeza barns por fissão é um resultado da divisão entre a seção de choque de absorção total dos produtos de fissão pelo número total de fissões acumulados, logo, esta diferença no número total de fissões não justifica a discrepância no resultado final.

Ainda, com relação ao número de fissões, existe uma diferença razoável no número de fissões do nuclídeo Pu241 mas, é importante lembrar que neste sistema o nuclídeo Pu239 contribui com mais de 92% das fissões e o nuclídeo Pu241 com apenas 8% das fissões. Assim esta diferença no número de fissões do nuclídeo Pu241 é muito pequena quando comparada com o número total de fissões.

O fator seção de choque dos produtos de fissão é um termo onde a comparação só pode ser feita entre os dados do Cinder-2 e o Fissprod, de forma que apenas consistirá de uma comparação de dados e metodologias de um código para outro, as discrepâncias mais sensíveis estão na Tabela 5.8..

Mesmo que seja uma comparação de dados, para verificar se estas seções de choque estariam ocasionando uma discrepância, tomou-se as seções de choque utilizada pelo Fissprod substituindo no Cinder-2 para os nuclídeos da Tabela 5.9.

Nesta substituição não se verificou nenhuma mudança significativa no resultado final, isto se deve ao fato de que a grandeza barns por fissão em termos do numerador representa a soma de todas as seções de choque macroscópica e quando esta grandeza é tomada ao final do intervalo de resfriamento, somente os nuclídeos estáveis ou de meia vida longa irão contribuir nesta grandeza.

Um outro ponto verificado foi o valor do "yield" para os produtos de fissão entre o Fissprod e o Cinder-2, observando-se pequenas diferenças nas, neste caso não foi possível substituir um valor pelo outro pois não era disponível a cadeia tratada pelo Fissprod e com relação ao Cinder-2 isto se torna um pouco mais complexo na medida em que certos valores de "yields" na verdade não correspondem exatamente ao "yield" real, dependendo da cadeia utilizada.

Após a análise dos eventuais fatores que poderiam ter ocasionado a discrepância, observou-se pela referência que em particular para a amostra A9D, as concentrações dos nuclídeos pesados foram calculadas através de extrapolação dos valores determinados quimicamente.

Portanto não foi possível chegar a uma conclusão a respeito da discrepância na medida, não podemos questionar o

valor medido por falta de informações e mesmo que houvesse uma soma das contribuições dos fatores citados, isto não justificaria a discrepância.

### Conclusões e Trabalhos Futuros

O estudo da contribuição dos produtos de fissão na forma qualitativa e quantitativa, ao longo da queima, trouxe elementos para podermos analisar e classificar os produtos de fissão segundo o comportamento e a importância em termos de absorção de neutrons.

Decorrente destas informações foram elaboradas as cadeias lineares apropriadas e tratadas através do código CINDER-2 no cálculo da transmutação e a parte referente ao cálculo celular sendo executado pelo código HAMMER-TECHNION, constituindo-se o sistema HAMMER/TECHNION-CINDER-2.

O sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 foi avaliado através de dois "benchmark" distintos: numérico e experimental.

Com relação ao "benchmark" numérico observou-se boa concordância de resultados em termos do parâmetro K-infinito para vários enriquecimentos em função de queima, quando comparado com os demais códigos.

Ressaltando que em termos de comportamento do parâmetro K-infinito em função da queima e enriquecimento o resultado deste sempre se mostrou coerente com outros centros internacionais.

Com relação ao "benchmark" experimental foram observados resultados muito bons para as duas amostras (U233 e U235), onde o maior desvio encontrado foi de 3.4% para a amostra (A3F) e

menor desvio foi de 0.75% para a amostra (A5F) conforme a Tabela 5.7.

Para as amostras de plutônio no entanto encontraram-se discrepâncias razoáveis e em função desta discrepância analisaram-se eventuais fatores que contribuíssem para a discrepância, não chegando a nenhum resultado conclusivo, mesmo colocando-se a soma dos efeitos analisados.

Neste sentido é importante salientar que a medida correta e confiável atualmente para se determinar o número de fissões é a técnica do Nd148/2/, desta forma um dos pontos questionáveis nesta experiência e a determinação da queima das amostras, principalmente para a amostra de Pu239.

Apesar desta discrepância, o sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 apresenta grandes vantagens quando comparado com os demais códigos que utilizam modelos de pseudo-produto de fissão mais tratamento explícito de algumas cadeias.

O sistema HAMMER-TECHNION/CINDER-2 trata os produtos de fissão responsáveis aproximadamente por 99.0% das absorções de neutrons na forma explícita através de cadeias lineares, desta forma não está sujeito a dependência de certas classes de problemas, enquanto que nos modelos de pseudo-produtos de fissão em muitos casos é dependente da classe de problemas(enriquecimento, queima, material fissil ou fissionável do sistema)/37/.

Além desta principal vantagem o sistema HAMMER/TECHNION-CINDER-2 é útil para analisar as concentrações dos produtos de fissão ao longo da queima, assim como a atividade destes produtos de fissão, pois o sistema acoplado possui opção para fornecer o inventário dos nuclídeos actnideos e dos produtos de fissão ao longo da queima.

Este estudo não considerou o efeito da autoblindagem devido aos produtos de fissão, pois segundo a referência/81/, um trabalho referente ao efeito dos produtos de fissão em reatores tipo HCLWR, o efeito da autoblindagem contribui com apenas 0.6% aproximadamente no fator de multiplicação ( $K$ -infinito), observando que estes tipos de reatores(HCLWR) são reatores caracterizados, basicamente por terem uma razão de conversão maior e caracterizados por um espectro mais "duro", portanto é importante considerar o efeito da autoblindagem dos produtos de fissão, principalmente para nuclídeos com ressonâncias na região intermediária.

Como trabalhos futuros podemos citar:

1) Analisar a discrepância verificada na amostra de Pu239 com mais detalhes, se possível localizar um outro tipo de experimento envolvendo este nuclídeo.

2) Considerar o restante dos produtos de fissão no sistema através que um esquema de pseudo-produto de fissão ou explicitamente.

3) Reformular o algoritimo do CINDER-2 a fim otimizar o tempo computacional, tomando como referência o código Epri-Cell e melhorar a manipulação das bibliotecas.

4) Analisar o efeito da autoblindagem devido aos nuclídeos com ressonâncias na região intermediária de energia.

## APENDICE A

### A.1 Introdução

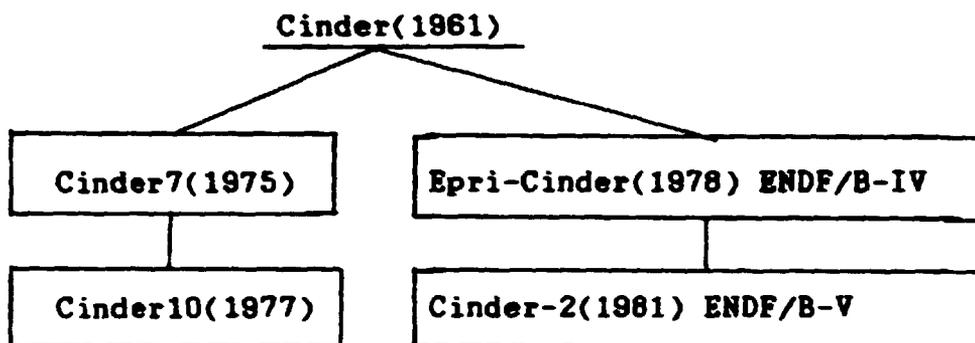
O código Cinder, publicado inicialmente em 1962 /21/ desenvolvido por T.R.England para cálculo de absorção de neutrons e calor de decaimento devido aos produtos de fissão durante a irradiação do combustível nuclear do reator foi ao longo do tempo sofrendo várias modificações e sendo disponível em várias versões /31,92/ como ilustrado na Figural.

Apesar de várias versões, o código sempre manteve a estrutura central do algoritimo que é a resolução das equações de transmutação através da equação de Bateman e as cadeias lineares.

Este código foi escolhido para servir de rotina para o tratamento dos produtos de fissão neste trabalho devido a sua simplicidade, versatilidade e a precisão em vários cálculos relacionados com produtos de fissão/17,20,22,26-30,35,54,55,75,78,90/.

A metodologia de resolução baseia-se no uso da técnica de cadeias lineares, o que simplifica bastante a resolução das complexas cadeias de transmutação. Esta técnica consiste em montar as cadeias segundo um único tipo de acoplamento e descrever as densidades do nuclídeos em termos parciais,tal que, ao final, a densidade total será a soma das partes parciais.

Figura 1. Esquema da evolução do código Cinder



## A.2 Metodologia de Cálculo

A metodologia de cálculo consiste em resolver a equação de transmutação para um dado nuclídeo através da equação abaixo:

$$\frac{d}{dt} N_n(t) = \sum_k \gamma_n^k S_k(t) + \gamma_{n-1}(t) N_{n-1}(t) - \beta_n(t) N_n(t) \quad (A-1.)$$

onde  $S_k(t)$  = densidade de fissão do k-ésimo nuclídeo

A equação acima está restrita ao seguinte vínculo:

$$PD(t) = \sum_k G_k N_k(t) A_k^f(t) \quad (A-2.)$$

onde  $PD(t)$  = densidade de potência

$A_k^f(t)$  = taxa de fissão por nuclídeo do nuclídeo k

A equação (A-2) escrita em forma de 4 grupos de energia

$$PD(t) = \phi^4(t) \sum_k G_k N_k(t) \sum_{j=1}^4 \sigma_{fk}^j(t) \frac{\phi^j(t)}{\phi^4(t)} \quad (A-3.)$$

As equações acima determinam completamente a densidade dos produtos de fissão dependentes do tempo.

A estratégia utilizada pelo Cinder-2, para cálculo da variação temporal da concentração dos produtos de fissão é a aproximação "quasi-estática", que consiste em dividir a vida do reator em intervalos de tempo e considerar o fluxo, taxa de fissão e a seção de choque constantes, desta forma a solução da equação(A-1.) tem a seguinte forma:

$$N_n(t+\Delta t) = \sum_{m=1}^n \frac{1}{\gamma_n} \sum_{k=m}^n \gamma_k \left\{ \frac{Y_m S}{\gamma_n} \left[ \frac{1}{\sum_{i=m}^n \beta_i} - \sum_{j=m}^n \frac{\exp\{-\beta_j \Delta t\}}{\sum_{i=m, i \neq j}^n (\beta_i - \beta_j)} \right] + N_n(t) \sum_{j=n}^n \left[ \frac{\exp\{-\beta_j \Delta t\}}{\sum_{i=m, i \neq j}^n (\beta_i - \beta_j)} \right] \right\} \quad (A.4)$$

onde  $\Delta t$  é o intervalo de tempo considerado, todos os parâmetros  $\beta$ 's,  $\gamma$ 's e  $Y_m S$  são mantidos constantes durante o intervalo de tempo  $\Delta t$ . e  $Y_m S$  é a taxa média de produção do nuclídeo  $n$  devido aos nuclídeos fissionáveis.

A equação acima é codificada computacionalmente no Cinder-2 e para o cálculo da densidade dos actnídeos toma-se o fator  $Y_m S=0$ .

Inicialmente, o Cinder-2 resolve as cadeias dos actnídeos e depois as cadeias dos produtos de fissão.

O cálculo da produção média de um dado nuclídeo é feito da seguinte forma:

$$\overline{Y_{NS}} = \sum_k Y_k^f \frac{\Delta P_k}{\Delta t} \quad (A-5.)$$

onde:

$$\Delta P_k = \frac{N_k(t) + N_k(t+\Delta t)}{2} \lambda_k^f \Delta t \quad (A-6.)$$

A partir da equação(A-4.) e das cadeias lineares pré-definidas em termos de biblioteca, o código procede ao cálculo do inventário para cada intervalo de tempo, além do inventário em termos de densidade, o código calcula para este intervalo de tempo outras quantidades como: atividade do nuclídeo, seções de choque de absorção macroscópicas por grupo, calor de decaimento, etc. Com relação às cadeias lineares, o código as manipula utilizando a estratégia de verificar se determinado nuclídeo está na soma ou não da cadeia, desta forma, assegura-se que a soma das concentrações parciais seja a concentração total. Além disso para o código executar o cálculo de uma forma precisa é feita internamente uma análise do erro de truncamento a fim de garantir a precisão adequada ao cálculo .

A equação (A-4.) necessita não só de cadeias lineares, mas também de todos os dados nucleares relacionados a ela, tais como: constantes de decaimento, seções de choque em grupo, fração de produção de um dado nuclídeo via fissão de um determinado nuclídeo fissil, frações de ramificação (probabilidade de ocorrer um evento em relação ao outro, ex: decaimento e absorção). Os dados nucleares são função da cadeia

linear e desta forma, é necessário executar corretamente a montagem das cadeias lineares a fim de que possa descrever corretamente o processo.

Como o propósito inicial do código Cinder-2 é fornecer informações a respeito da produção dos produtos de fissão ao longo da queima e as quantidades relacionadas, adotaram-se algumas simplificações.

Uma das aproximações é considerar que os nuclídeos com meia vida curta decaiam instantaneamente, desta forma manipula-se a fração de produção de um dado nuclídeo relacionando este efeito ao seu sucessor na cadeia; outra aproximação é considerar desprezível o acoplamento via decaimento alfa dos actínideos. Ao longo do tempo o código Cinder sofreu mudanças quanto ao aspecto do número de nuclídeos e cadeias lineares tratadas pois inicialmente a primeira versão continha 169 produtos de fissão em 67 cadeias lineares mais tarde foram incorporadas mais cadeias e nuclídeos totalizando 179 produtos de fissão em 69 cadeias lineares.

Em 1974 o Laboratório Nacional de Brookhaven compilou dados para os produtos de fissão na qual constituiu-se a biblioteca ENDF/B-IV para produtos de fissão /25/, desta forma o código Cinder-2 utilizou-se desta biblioteca e assim incorporou 188 produtos de fissão em 84 cadeias lineares no tratamento, esta versão é denominada Epri-Cinder.

Finalmente, com a biblioteca ENDF/B-V /77,89/, o código Cinder incorporou ao seu tratamento 102 cadeias lineares descrevendo um total de 211 produtos de fissão e 39 cadeias lineares para descrever 48 nuclídeos actínideos, que veio a se constituir no código Cinder-2/93/.

Uma outra estrutura possível é a estrutura reduzida de cadeias. Nesta estrutura são tomados 27 nuclídeos que são

responsáveis pela maior parte das absorções parasitárias de neutrons, colocando em 11 cadeias, e as demais são tratadas sob um esquema de nuclídeo fictício, sendo a décima segunda cadeia referente a este nuclídeo fictício; esta estrutura é apropriada para o uso em códigos de cálculos celulares para executar o tratamento da queima.

As bibliotecas de dados nucleares ENDF/B-IV e ENDF/B-V para os produtos de fissão, representaram um grande desenvolvimento e melhoria em termos de dados nucleares para serem utilizados em códigos de cálculo de inventário pois possibilitou a verificação de dados e códigos com diversos experimentos/17,26,90/.

As seções de choque para o uso do Cinder-2 devem ser processadas em quatro grupos de energia e estes dependem do tipo de reator em questão devido ao espectro de neutrons. Desta forma as seções de choque da biblioteca ENDF são processadas pelo código NJOY /81/ e colapsadas com o código TOAFEW /92/ para quatro grupos de energia com o espectro característico de um reator PWR dado pelo PRS /92/.

A Tabela abaixo mostra a estrutura de grupos de energia tratada pelo código Cinder-2.

Tabela A.1. Estrutura de grupos de energia do código Cinder-2

Group 1	$1.000000000 \times 10^7$ eV
	$8.208499862 \times 10^5$ eV
Group 2	$5.530843701 \times 10^3$ eV
Group 3	$6.250600000 \times 10^{-1}$ eV
Group 4	$1.000000000 \times 10^{-5}$ eV

Os dados necessários para execução do código, basicamente, resumem se em:

- a) parâmetros de escolha de opção de cálculo;
- b) razão de fluxos em quatro grupos para cada intervalo de tempo;
- c) dados da concentração inicial do material combustível;
- d) densidade de potência ou o fluxo térmico;
- e) seções de choque dos nuclídeos actnídeos para cada intervalo de tempo.

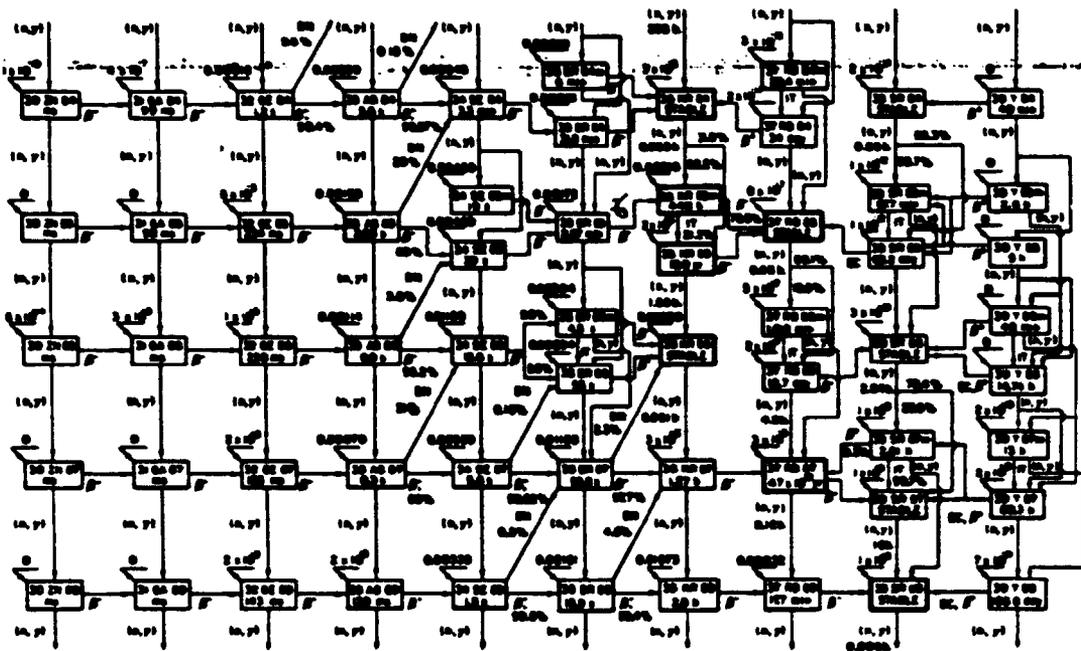
Como saída, o código fornece ao fim de cada intervalo de tempo as seguintes quantidades

- a) fluxo térmico total;
- b) amplitude do fluxo por grupo de energia;
- c) barns/fissão por nuclídeo e grupo de energia;
- d) densidade de cada nuclídeo;
- e) atividade de cada nuclídeo e atividade total;
- e) seção de choque macroscópica de absorção por grupo de energia para cada nuclídeo.

### A.3 Cadeias do Cinder-2

Como já foi citado anteriormente, as cadeias acopladas dos produtos de fissão são bastante complexas, desta forma o Cinder-2 resolve a equação de transmutação utilizando se das cadeias lineares. A Figura abaixo ilustra a complexidade dos problemas das cadeias:

Figura A.1 Cadeia dos produtos de fissão com nuclídeos de massa  $84 < A < 88$



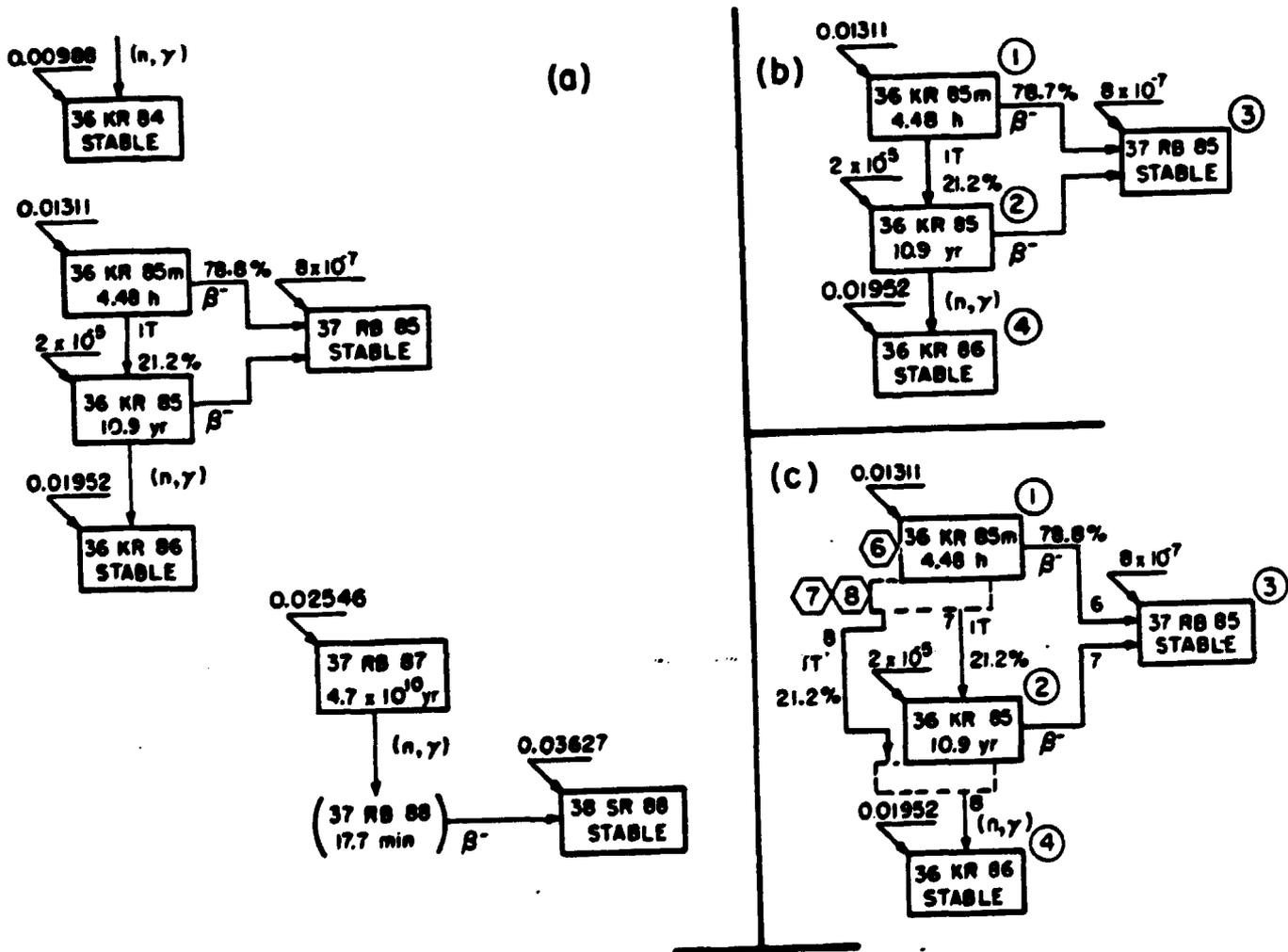
Observa-se, na Figura acima, a complexidade de se resolver estas cadeias, entretanto, como o interesse do estudo reside numa descrição da variação temporal dos absorvedores de neutrons, podemos tomar algumas simplificações. Para tomar as simplificações, é necessário um estudo prévio do assunto para não desprezar nuclídeos que contribuem para estudo.

Unas das simplificações nas cadeias é desprezarmos nuclídeos com meia vida bastante curta, se as concentrações e as seções de choque destes são baixas, dentro destas considerações sabe-se que isóbaros com números atômicos baixos estão abaixo da linha estabilidade, estes nuclídeos têm uma meia vida bastante curta. Desta forma as cadeias tratadas no Cinder-2 englobam apenas nuclídeos com meia vida superior a quatro horas.

Outra simplificação no problema consiste em desprezar nuclídeos com "yield" baixo da cadeia; importante observar que exclui-se apenas o nuclídeo, mas fisicamente é considerada a sua contribuição através de uma manipulação onde associa-se um "yield" fictício a um outro nuclídeo da cadeia, sob este ponto de vista é necessário conhecer a importância dos acoplamentos a

fim de que cadeia descrita possa representar o processo de transmutação de uma forma realista.

Utilizando as aproximações acima descritas simplificamos o problema da Figura 1. que continha 57 nuclídeos para sete nuclídeos, como ilustrado nas figuras abaixo:



**As cadeias consideradas no Cinder-2 são:**

1. Zn72-> Ga72-> Ge72-> Ge73-> Ge74
2. As75
3. Ge76-> Ge77-> As77-> Se77-> Se78-> Se79-> Se80
4. Br81-> Br82-> Kr82-> Kr83-> Kr84
5. Se82
6. Kr85-> Rb85-> Rb86-> Sr86
7. Kr85-> Kr85M-> Rb85-> Rb86-> Sr86
8. Kr83-> Kr85M-> Kr86
9. Kr87-> Rb87-> Rb88-> Sr88
10. Kr88-> Rb88-> Sr88
11. Kr89-> Rb89-> Sr89-> Y89-> Y90-> Zr90
12. Sr9--> Y90-> Zr90
13. Sr90-> Sr91-> Y91-> Zr91-> Zr92-> Zr93
14. Sr92-> Y92-> Zr92-> Zr93
15. Y93-> Zr93
16. Zr94-> Zr95-> Nb95-> Mo95-> Mo96-> Mo97
17. Zr94-> Zr95-> Nb95M-> Mo95-> Mo96-> Mo97
18. Zr94-> Zr95-> Nb95M-> Nb95-> Mo95-> Mo96-> Mo97
19. Zr96-> Zr97-> Nb97-> Mo97-> Mo98-> Mo99-> Tc99M->  
-> Tc99-> Ru100-> Ru101
20. Mo98-> Mo99-> Tc99-> Ru100-> Ru101
21. Mo100-> Ru101-> Ru102-> Rh102-> Rh103-> Pd104->  
-> Pd105-> Pd105-> Pd107
22. Ru104-> Ru105-> Pd105-> Pd106
23. Ru104-> Ru105-> Rh105-> Pd106
24. Ru1096-> Pd106-> Pd107-> Pd108-> Pd109-> Ag109->  
-> Ag110M-> Cd110

25. Ru106-> Pd107-> Pd108-> Pd109-> Ag109
26. Pd109-> Ag109-> Cd110
27. Pd110-> Ag111-> Cd111-> Cd112-> Cd113-> Cd114->  
-> Cd115-> In115-> Sn116
28. Pd112-> Cd112-> Cd113-> Cd114-> Cd115-> In115->  
-> Sn116
29. Cd114-> Cd115M-> In115-> Sn116
30. Cd116-> Sn117-> Sn118-> Sn119-> Sn120
31. Sn121M-> Sb121-> Sb122-> Te122
32. Sn121-> Sb121-> Sb122-> Te122
33. Sn122-> Sb123-> Sb123-> Sb124-> Te124
34. Sn122-> Sb123-> Sb124-> Te124
35. Sn124-> Sn125-> Sb125-> Te125M-> Te125
36. Sn124-> Sn125-> Sb125-> Te125
37. Sn126-> Te126-> Te127-> I127-> Xe128
38. Sn126-> Te126-> Te127M-> Te127-> I127-> Xe128
39. Sn126-> Sb126-> Te126-> Te127-> I127-> Xe128
40. Sn126-> Sb126-> Te126-> Te127M-> Te127-> I127->  
-> Xe128
41. Sb127-> Te127M-> Te127-> I127-> Xe128
42. Sb127-> Te127-> I127-> Xe128
43. Sb128-> Te128-> Te129-> I129-> I130-> Xe130->  
-> Xe131
44. Sb128-> Te128-> Te129M-> Te129-> I129-> I130->  
-> Xe130-> Xe131
45. Sb128-> Te128-> Te129M-> Te129-> I129-> Xe130->  
-> Xe131
46. Sb128-> Te128-> Te129-> I129-> Xe130-> Xe131
47. Sb128-> Te128-> Te129M-> I129-> I130-> Xe130->  
-> Xe131
48. Sb128-> Te128-> Te129M-> I129-> Xe130-> Xe131

49. Sb129-> Te129M-> Te129-> I129-> I130> Xe130->  
-> Xe131
50. Sb129-> Te129M-> Te129-> I129-> Xe130-> Xe131
51. Sb129-> Te129-> I129-> I130-> Xe130-> Xe131
52. Sb129-> Te129-> I129-> Xe130-> Xe131
53. Sb129-> Te129M-> I129-> I130-> Xe130-> Xe131
54. Sb129-> Te129M-> I129-> I130-> Xe130-> Xe131
55. Te130
56. TE131m-> I131-> Xe131-> Xe132-> Xe133-> Cs133
57. Te131M-> I131-> Xe131-> Xe132-> Xe133-> Cs133
58. Te132-> I132-> Xe132-> Xe133-> Cs133-> Cs134
59. Te132-> I132-> Xe132-> Xe133M-> Xe133-> Cs133
60. I133-> Xe133-> Xe134-> Xe135-> Cs135-> Cs136->  
-> Ba136-> Ba137
61. I133-> Xe133M-> Xe133-> Cs133
62. I133-> Xe133-> Cs133-> Cs134-> Cs135
63. I133-> Xe133-> Cs133-> Cs134-> Ba134
64. Te134-> I134-> Xe134-> Xe135-> Cs135-> Cs136->  
-> Ba136-> Ba137
65. I135-> Xe135-> Cs135-> Cs136-> Ba136
66. I135-> Xe135-> Xe136-> Xe137-> Cs137-> Cs138->  
-> Ba138
67. I135-> Xe135M-> Xe135-> Cs135-> Cs136-> Ba136->  
-> Ba137
68. I135-> Xe135M-> Xe135-> Xe136-> Xe137-> Cs137->  
-> Cs138-> Ba138
69. Xe137-> Cs137-> Ba137-> Ba138-> Ba139-> La139->  
-> La140-> Ce140
70. Xe138-> Cs138-> Ba138-> Ba139-> La139-> La140->  
-> Ce140
71. Ba140-> La140-> Ce140-> Ce141-> Pr141

72. Ba141-> La141-> Ce141-> Pr141-> Pr142-> Nd142->  
-> Nd143
73. Ba41-> La141-> Ce141-> Pr141-> Pr142-> Pr143->  
-> Nd143
74. Ba142-> La142-> Ce142-> Ce143-> Pr143-> Nd143->  
-> Nd144-> Nd145
75. Ce143-> Ce144-> Nd144-> Nd145
76. Ce143-> Pr143-> Nd144-> Nd145
77. Ce143-> Ce144-> Pr145-> Nd145
78. Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Pm148M->  
-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152-> Sm153->  
-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Gd156
79. Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Pm148->  
-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152-> Sm153->  
-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Eu156-> Gd156
80. Pr145-> Nd145->< Nd146-> Nd147-> Pm147-> Sm147->  
-> Sm148-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152
81. Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Pm148M->  
-> Sm148-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152
82. Pr145-> Nd145-> Nd146-> Nd147-> Pm147-> Pm148->  
-> Sm148-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152
83. Nd147-> Pm147-> Pm148M-> Pm149-> Sm150-> Sm151
84. Nd147-> Pm147-> Pm148-> Pm149-> Sm150-> Sm151
85. Nd147-> Nd148-> Pm149-> Sm149
86. Nd147-> Pm147-> Pm148M-> Pm148-> Sm148-> Sm149->  
-> Sm150-> Sm151
87. Nd147-> Pm147-> Pm148M-> Pm148-> Pm149-> Sm149->  
-> Sm150
88. Nd148-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152->  
-> Sm153-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Eu156-> Gd156->  
-> Gd157
89. Nd148-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152->  
-> Sm153-> Eu153-> Eu154-> Gd154-> Gd155
90. Nd148-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152->  
-> Sm153-> Eu153-> Eu154-> Eu155-> Gd155

91. Nd148-> Pm149-> Sm149-> Sm150-> Sm151-> Sm152
92. Pm149-> Sm149
93. Nd150-> Pm151-> Sm151-> Sm152-> Sm153-> Eu153->  
-> Eu154-> Eu155-> Eu156-> Gd156-> Gd157
94. Nd150-> Pm151-> Sm151-> Sm152-> Sm153-> Eu153->  
-> Eu154-> Eu155-> Gd155
95. Nd150-> Pm151-> Sm151-> Eu151
96. Nd150-> Pm151-> Sm151-> Sm152-> Sm153-> Eu153->  
-> Eu154-> Gd154-> Gd155
97. Pm151-> Sm152-> Sm153
98. Sm154-> Eu155-> Eu156-> Gd156-> Gd157-> Gd158
99. Sm154-> Eu 155-> Gd155
100. Eu157-> Gd157-> Gd158-> Gd159-> Tb159-> Tb160->  
-> Dy160-> Dy161-> Dy162
101. Eu157-> Gd157-> Gd158-> Gd159-> Tb159-> Tb160->  
-> Tb161-> Dy161-> Dy162
102. Gd160

## APENDICE B

### B.1 Técnica da Cadeia Linear

Para a análise de transmutação é necessário descrever as cadeias de eventos nas quais os nuclídeos se transformam através de reações nucleares.

Para tanto é preciso descrever as cadeias e resolver a equação de transmutação convenientemente para o problema a ser analisado. Basicamente, existem duas formas de abordar o problema para resolver o conjunto de equações diferenciais de primeira ordem acopladas. O primeiro método consiste na técnica da matriz exponencial /9/ e a segunda consiste na técnica das cadeias lineares/21/.

A resolução através da técnica de cadeias lineares consiste em decompor as complexas cadeias de transmutação em um conjunto de cadeias lineares. Ilustraremos o método através da seguinte cadeia hipotética:

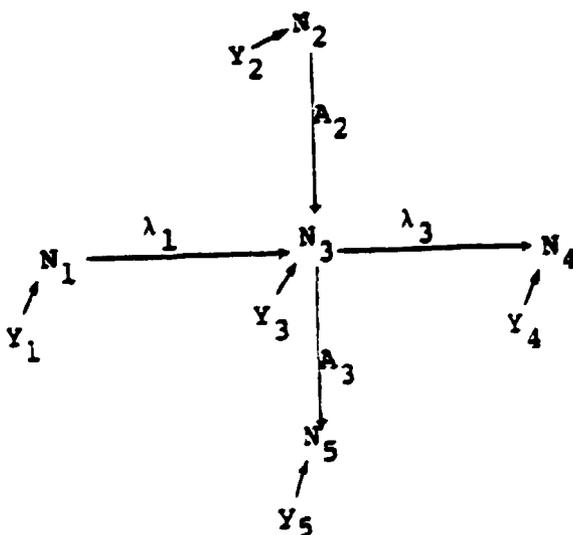


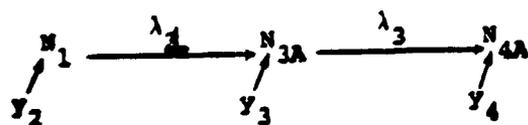
Figura B.1. : Cadeia Hipotética de Transmutação

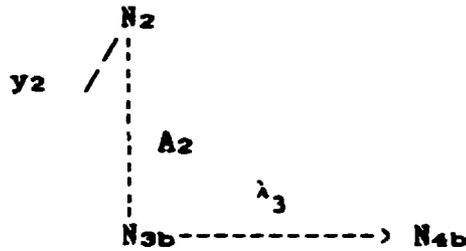
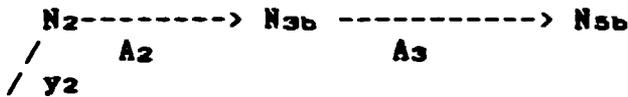
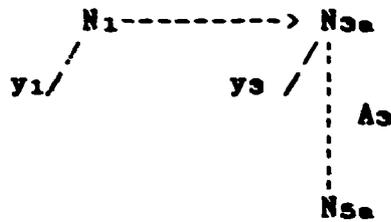
diretamente via fissão. Entretanto, o processo inerente a cadeia é a reação de absorção e decaimento radioativo.

Desta forma, o processo de formação do nuclídeo  $N_3$  pode ser decomposto em duas partes distintas; sendo que nuclídeo  $N_3$  será representado parcialmente em termos de  $N_{3a}$  e  $N_{3b}$  e a concentração total deste nuclídeo será a soma das partes.

A concentração parcial  $N_{3a}$  deve-se à contribuição do decaimento radioativo do nuclídeo  $N_1$  e a outra concentração parcial  $N_{3b}$  e a contribuição devido a reação de captura de neutrons do nuclídeo  $N_2$ . Desta forma até o nuclídeo  $N_3$  podemos escrever duas cadeias e o termo "yield" de fissão pode ser atribuída a qualquer uma das cadeias sem perder a generalidade do tratamento. Para o nuclídeo  $N_4$  existem também duas possibilidades para a sua formação, decaimento radioativo do nuclídeo  $N_3$  ou diretamente via fissão, mas como a densidade do nuclídeo  $N_3$  pode ser decomposta em duas partes da mesma forma pode se considerar que o nuclídeo  $N_4$  pode ser decomposto em duas partes distintas ( $N_{4a}$  e  $N_{4b}$ ). O procedimento análogo pode ser aplicado ao nuclídeo  $N_5$ . Assim determina-se um novo conjunto de cadeias na forma linear apenas considerando um caminho mas, escrita de forma parcial tal que a soma das frações parciais seja a concentração total. No processo de linearização das cadeias não existe um caminho apenas, pode se escolher de forma conveniente o formato das cadeias, mas sem perder a representatividade do sistema.

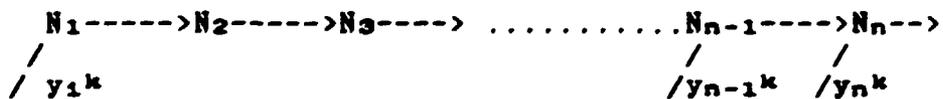
Assim o novo conjunto de cadeias será:





Com o processo de linearização a cadeia hipotética transformou-se num conjunto de quatro cadeias, de forma que descrevem corretamente todo o processo.

Escrevendo de uma forma genérica uma cadeia linear temos:



A equação de balanço para o nuclídeo  $N_n$  pode ser escrita como sendo:

$$\frac{d}{dt} N_n(t) = \sum_k \gamma_{n-1}^k(t) N_{n-1}(t) - \beta_n(t) N_n(t)$$

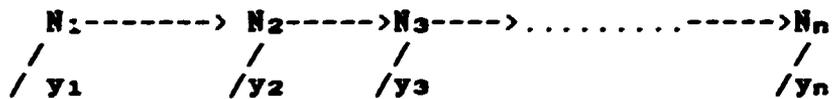
Com a técnica da cadeia linear as complexas cadeias ilustradas na Figura A.1. , reduziram-se a um conjunto de quatro

cadeias para descrever cinco nuclídeos e em cada cadeia com apenas três nuclídeos. Embora o número de equações aumente, este problema simplifica-se na medida em que as equações são simples e a forma das cadeias são bastante compreensíveis.

### B.2 Equação de BATEMAN

No problema de transmutação, a equação que rege o processo para o sistema é a equação de balanço, onde a variação temporal da concentração de um dado isótopo é dada pela diferença dos modos de produção e modos de destruição. Existem várias formas de se resolver a equação diferencial que descreve o processo de transmutação nuclear mas baseada nas cadeias lineares a equação de transmutação pode ser resolvida analiticamente e tal equação é conhecida como a equação de Bateman/7/.

Através de uma representação esquemática de uma cadeia temos a equação para o n-ésimo termo da cadeia:



$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{k=1}^K y_1^{k,i} s^k - N_i (\lambda_i + A_i) + N_{i-1} \alpha_{i-1} \gamma_{i-1}$$

onde:

$y_1^{k,i}$  = "yield" do nuclídeo i devido ao nuclídeo fissil k

s = taxa de fissão

$A_i$  = taxa de destruição via absorção

$\lambda_i$  = constante de decaimento

$\gamma_{i-1}$  = forma de acoplamento com o nuclideo i-1, pode ser  $\lambda_{i-1}$  ou  $A_{i-1}$ .

Utilizando algumas propriedades da transformada de Laplace e aplicando na equação acima temos:

$$N_n(t+\Delta t) = \sum_{m=1}^n \frac{1}{\gamma_n} \sum_{k=m}^n \gamma_k \left\{ \frac{1}{\gamma_m S} \left[ \frac{1}{n} - \sum_{j=m}^n \frac{\exp(-\beta_j \Delta t)}{\sum_{\substack{i=m \\ i \neq j}}^n (\beta_i - \beta_j)} \right] \right. \\ \left. + N_n(t) \sum_{j=n}^n \left[ \frac{\exp(-\beta_j \Delta t)}{\sum_{\substack{i=m \\ i \neq j}}^n (\beta_i - \beta_j)} \right] \right\}$$

#### APENDICE C

##### C.1 Código Hammer-Technion

Normalmente, no ramo da Engenharia Nuclear existem códigos para executar diversas tarefas, entre os quais aqueles que fornecem parâmetros e grandezas características das diversas células que compõem o núcleo do reator.

Neste sentido os códigos de geração de constantes de multigrupo tem a tarefa de fornecer as constantes de grupo característico da célula para serem utilizadas por outros códigos, códigos de cálculo da equação de difusão ou transporte que farão o cálculo do reator/36,58,72/. Entre vários códigos de geração de constantes de poucos grupos /5,13,46,69/, um dos mais conhecidos é o código HAMMER/13,66/.

Antes de descrever o código HAMMER, faremos uma apresentação dos pontos gerais dos códigos de geração de constantes de multigrupo.

Uma coisa em comum nestes códigos é a resolução da equação de transporte de neutrons, dentro da célula característica,

isto é, a equação de transporte de neutrons é resolvida para várias regiões( combustível, encamisamento, moderador), fornecendo após o cálculo as constantes características desta célula em questão.

A parte referente ao cálculo energético para geração de constantes de grupo é dividida em duas partes, isto é, divide-se o problema em duas regiões de energia. Uma parte do código descreve o comportamento do sistema na região conhecida como térmica ,e a outra parte referente à energia superior à térmica, denominada, grosseiramente de região rápida .Além deste procedimento usual existem códigos como XSDRNPM que não fazem distinção entre as regiões de energia e calculam para todo intervalo desde a região térmica até a região rápida.

A região de energia térmica é caracterizada pelo processos de termalização e espalhamento de neutrons, enquanto que a região acima da região térmica é caracterizada por processos de moderação, espalhamentos elásticos e inelásticos, absorção de neutrons na região de ressonâncias resolvidas e não resolvidas.

A região acima da térmica devido a características mais ou menos distintas é separada em três grupos. A região de mais alta energia é caracterizada pelas fissões rápidas e espalhamento inelástico, a região intermediária pela moderação de neutrons e, finalmente, a região imediatamente superior à térmica é caracterizada pelas absorções nas ressonâncias.

Então, geralmente as constantes de grupo descrevem o comportamento destas quatro regiões, para tratamento mais grosseiro podem se geradas as constantes em dois grupos denominadas térmica e rápida.

Além disso, estes códigos, em geral, contam com uma biblioteca de dados que, normalmente, é descrita por um

conjunto de seções de choques em estrutura de grupos finos. Estas seções de choque são geradas para uso geral em problemas para cálculo de geração de constante de multigrupo, de maneira que as seções de choque da região térmica são ponderadas pelo espectro Maxwelliano, a região intermediária é ponderada por um espectro que varia inversamente com a energia e a região rápida pelo espectro de fissão. A estrutura de grupo fino destas bibliotecas em geral descreve as seções de choque em um conjunto em torno de 50 a 100 grupos de energia. Na estrutura das seções de choque em multigrupos é importante a escolha de números de grupos de energia a fim de garantir a descrição das características das várias regiões.

Com a biblioteca de estrutura de multigrupo e mais os dados referentes à célula, o código fornece as constantes de multigrupo que, em geral, são seções de choque homogeneizadas e colapsadas para quatro grupos de energia.

Estas seções de choque em poucos grupos são geradas através da colapso das seções de choque em multigrupo, através do espectro de neutrons característico da região, que é calculada pelo código levando-se em consideração a heterogeneidade do sistema

O espectro utilizado para colapsar as seções de choque em poucos grupos é obtido através do cálculo da equação de transporte de neutrons dependente da energia e da posição. Para tal é importante o sucesso na resolução da equação de transporte de neutrons nas várias regiões de energia.

A região térmica normalmente é caracterizada pelo equilíbrio térmico de neutrons, portanto deve obedecer às propriedades da função de distribuição de Maxwell-Boltzmann, no entanto, dependendo da energia de corte da região térmica torna-se necessário também descrever as ressonâncias existentes nesta região. Como o equilíbrio térmico é o resultado do

processo de termalização, isto implica em descrever corretamente este processo, para tal existem vários modelos aproximados, além disso, outro parâmetro que deve ser descrito é o núcleo de espalhamento.

De forma análoga, na região rápida existem espalhamentos, ressonâncias e o processo de moderação que também são descritos aproximadamente através de vários modelos de cálculo

A seguir será feita uma descrição do código HAMMER e a versão HAMMER-TECHNION.

O código HAMMER é uma ferramenta bastante conhecida para cálculo de parâmetros em poucos grupos e espectro de neutrons.

Basicamente, o código consiste em duas partes distintas, a parte térmica é tratada através do procedimento do programa THERMOS/47/, que resolve a equação de transporte integral unidimensional para obter a dependência espacial do espectro de neutrons da célula unitária.

A região de energia térmica é tratada no intervalo de  $1.000E-05$  eV à  $0.625$  eV de energia. A equação integral de transporte de neutrons para a densidade total de neutrons é resolvida para célula unitária em 30 grupos de energia, num dado intervalo de letargia para cada grupo

A versão HAMMER-TECHNION/13/ basicamente não sofreu modificação no tratamento da região térmica, isto é o procedimento adotado ainda é o mesmo do programa THERMOS, mas com a opção de cálculo de matriz de espalhamento através do método de CARLVIK, que é utilizado somente para a célula de geometria cilíndrica e tem se mostrado mais preciso que o método original.

O THERMOS resolve a equação integral de transporte de neutrons para cada grupo de velocidades e em cada subregião da célula unitária assumindo a heterogeneidade e a fuga como fenômenos independentes. Desta forma a equação integral de transporte é resolvida considerando-se a fuga nula, e com este espectro as seções de choque são homogeneizadas e a seguir é efetuado o cálculo homogêneo considerando a fuga.

O tratamento do espectro de neutrons nas regiões rápida e epitérmica do programa HAMMER-TECHNION segue basicamente as seguintes etapas nesta parte:

a) A solução da equação integral de transporte de neutrons na célula unitária

O procedimento para o cálculo da equação integral de transporte nas regiões rápida e epitérmica é resolvido para o fluxo escalar de neutrons. A equação integral de transporte de neutrons para o fluxo escalar na célula unitária é resolvida em 54 grupos de energia .

O cálculo da equação requer a distribuição espacial dos neutrons de fissão na célula unitária, essa distribuição é calculada anteriormente na parte térmica.

b) Solução concomitante da equação integral de transporte e cálculo da auto-blindagem das ressonâncias dos nuclídeos actnídeos.

O procedimento descrito anteriormente é aplicável aos intervalos de energia onde os nuclídeos actnídeos não apresentam ressonâncias.

Na região de ressonâncias resolvida  $E < 5.53$  Kev o fluxo escalar de neutrons apresenta depressões devido à auto-blindagem das ressonâncias dos nuclídeos actnídeos

(U235,U238,Pu239,etc). Esta parte do cálculo é executada usando o procedimento de Nordheim /64/ , devido a sua simplicidade, rapidez na execução e resultados satisfatórios. A solução simultânea da equação integral de transporte de neutrons e o cálculo de auto-blindagem das ressonâncias dos nuclídeos actinídeos é necessária devido ao fato que as seções de choque efetivas dependem do fluxo escalar de neutrons obtido através da solução da equação integral de transporte de neutrons, que por sua vez depende das seções de choque efetivas. No código HAMMER-TECHNION esse acoplamento é realizado em duas etapas distintas, o código trabalha com frações de absorções nas ressonâncias para levar em consideração o efeito da auto-blindagem das ressonâncias dos nuclídeos actinídeos. Na primeira etapa essas frações de absorções nas ressonâncias são consideradas iguais a zero de tal forma que a distribuição do fluxo escalar na célula unitária é obtida na ausência de ressonâncias. Este fluxo calculado é utilizado na segunda etapa no tratamento da auto-blindagem das ressonâncias com o método de Nordheim para definir a fração de absorção nas ressonâncias.

Após o cálculo das frações de absorções nas ressonâncias, a distribuição espacial do fluxo escalar é recalculada fazendo-se uso dessas frações de absorções. O fluxo escalar nas várias subregiões da célula unitária é reduzido devido às absorções nas ressonâncias e, portanto, o efeito da auto-blindagem é considerado.

Este processo é executado repetitivamente para todos os grupos de energia nas quais existam ressonâncias resolvidas.

Além do cálculo do efeito da auto-blindagem das ressonâncias resolvidas , o código HAMMER-TECHNION também calcula a auto-blindagem das ressonâncias não resolvidas.

c) Após o cálculo da equação integral de transporte de neutrons e o tratamento das ressonâncias resolvidas e não resolvidas em cada grupo, procede-se a homogeneização utilizando a distribuição espacial do fluxo de neutrons em cada grupo como função ponderação. Após a homogeneização procede-se ao colapsamento das seções de choque em poucos grupos de energia utilizando como função ponderação o espectro de neutrons obtido através da transformada de Fourier para a fuga no meio homogêneo. As equações finais constituem o procedimento do programa MUFT/12/, que utiliza as aproximações P1 e B1.

A versão disponível do HAMMER-TECHNION no IPEN/CNEN-SP trata de uma versão modificada a qual foi incorporada uma rotina de cálculo de queima. Esta rotina resolve as equações de transmutação para os nuclídeos actínidos e para os nuclídeos Xe135 e Sm149, explicitamente através da aproximação linear. Os demais produtos de fissão são tratados em forma de pseudo-produto de fissão que, genericamente é um nuclídeo fictício declarado nos dados de entrada. Este nuclídeo conta com as seções de choque em multigrupo na estrutura do HAMMER-TECHNION, sendo constante ao longo da queima, isto é não é considerado o efeito da queima nesta seção de choque. A figura abaixo ilustra as cadeias consideradas nessa rotina de cálculo de transmutação.

A Tabela abaixo mostra os intervalos de energia considerados pelo código HAMMER-TECHNION.

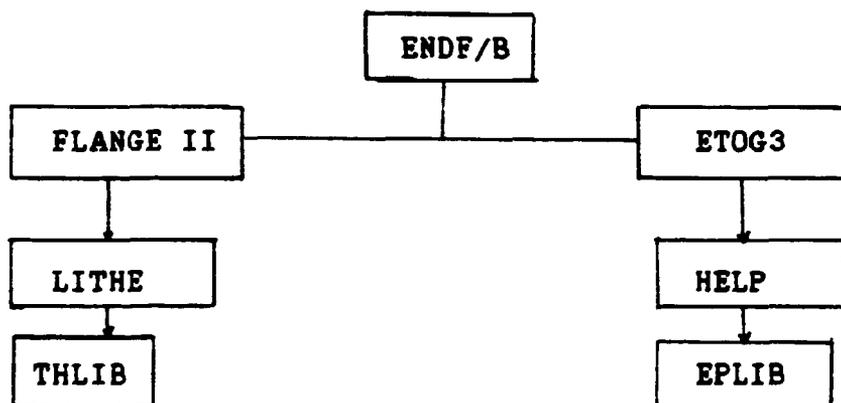
**Tabela 1. Limites de energia utilizados pelo Código HAMMER-TECHNION**

Grupo	Limite	
	Superior	Inferior
1	10 MeV	8.2085 KeV
2	8.208575	5.53 KeV
3	5.53 KeV	0.625 eV
4	0.625 eV	0.000 eV

## C.2 Biblioteca do HAMMER-TECHNION

As bibliotecas de dados nucleares térmicos e epitérmicos/rápidos necessárias para a execução do código HAMMER-TECHNION são elaboradas e armazenadas em dois caminhos distintos.

O esquema de geração de dados nucleares é ilustrado no diagrama abaixo:



O processamento dos dados nucleares começa com o arquivo de dados nucleares ENDF/B-IV. A parte referente à elaboração da biblioteca térmica (THLIB) é realizada com os programas FLANGE II /48/ e LITHE /13/. O programa FLANGE-II prepara as seções de choque em 30 grupos de energia com os dados nucleares do arquivo ENDF/B-IV, a partir da função ponderação escolhida entre as disponíveis para o programa.

A escolha mais comum é uma distribuição Maxwelliana na temperatura de aplicação do problema. Para materiais que possuem leis de espalhamento  $S(\alpha, \beta)$ , como o hidrogênio ligado na água, o programa FLANGE-II calcula a matriz de espalhamento térmica necessária no cálculo do espectro térmico, realizado pela parte térmica (THERMOS) do código HAMMER-TECHNION.

O programa LITHE prepara as seções de choque e as matrizes de espalhamento calculadas anteriormente pelo programa FLANGE-II, num formato compatível com a biblioteca térmica para o HAMMER-TECHNION. Para materiais que não possuem leis de espalhamento  $S(\alpha, \beta)$ , o programa LITHE possui a opção de calcular a matriz de espalhamento com o modelo de gás livre. A parte referente a elaboração da biblioteca epitérmica (EPLIB) é realizada com os programas ETOG-3 /4/ e HELP /13/. O programa ETOG-3 prepara as seções de choque, matriz de espalhamento inelástico e parâmetros necessários ao procedimento do programa MUFT, ( $\xi\sigma_s, \bar{\mu}\sigma_s$ , etc) em 54 grupos de energia. Além disso, para materiais que possuem ressonâncias, o programa ETOG-3 também prepara os parâmetros necessários ( $\Gamma_n, \Gamma_\gamma$ , etc) para o cálculo da autoblindagem nas ressonâncias. Essa última parte é efetuada para cada grupo onde ocorram as ressonâncias.

A preparação de todos esses dados nucleares para o formato compatível com a biblioteca epitérmica do HAMMER-TECHNION é realizada com o programa HELP.

Na biblioteca disponível no IPEN/CNEN-SP houve a substituição do nuclídeo U238 da biblioteca do HAMMER-TECHNION pelo nuclídeo U238 da biblioteca da versão original do HAMMER, pois os dados referentes a este nuclídeo mostraram ser mais precisos na biblioteca original.

## REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

(1) ALVARENGA, M.A.B. - Implantação de um novo cálculo de depleção do combustível no código CITHAM. In: FISICA de reatores : 5 encontro nacional, realizado em Rio de Janeiro, 10-12 abril, 1985. v.1, p.89-101.

(2) AMERICAN NUCLEAR SOCIETY. Decay heat in light water reactors. (ANS-5.1).

(3) ARMP : advanced recycle methodology program : cap.5 Pt.2. EPRI-CELL code description. Palo Alto, CA, Electric Power Research Institute, Sept. 1977. (report CCM-3)

(4) ARONSON, A. & ROTHENSTEIN, W. ETOG-3: modification for HAMMER with ENDF/B-IV data. BNL memorandum. Haifa, Israel Institute Technology ; 1976; supp. 1977.

(5) ASKEW, J.R.; FAYER, F.J.; KENSHELL, P.B. - A general description of the lattice code WIMS, J. Brit. Nucl. Energy Soc., 15:15-84, 1968 .

(6) ATEFI, B. A two-lump fission product model for fast reactor analysis, Trans. Am. Nucl. Soc. 38: 859-81, 1981 .

(7) BATEMAN, H. The solution of a system of differential equations occurring in the theory of radioactive transformations. Proc. Camb. Philos. Soc. (15) : 423; 1910.

(8) BELL, G.I. & GLASTONE, S. Nuclear Reactor Theory . New York, Reinhold, 1970.

(9) BELL, M.J. ORIGEN: the ORNL isotope generation and depletion code. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., 1973. (ORNL-4828).

(10) BENEDICT, M.; PIGFORD, T.H.; LEVI, H.W. Nuclear chemical engineering . 2ed. New York, McGraw-Hill, 1981.

(11) BENNET, L.L. Recomended fission product chains for use in reactor evaluations studies. Oak Ridge ,TN, Oak Ridge National Lab.,Sept. 1966. (ORNL-TM-1658 ).

(12) BOHL,H.Jr.; GELBARD,E.M.; RYAN,G.H. MUET-4: a fast neutron spectra code . Pittsburgh, PA, Bettis Atomic Power Lab.,1957. (WAPD-TM-22).

(13) BRAHEN, J.; ROTHENSTEIN, W.; TAVIV,E. The HAMMER code system , Palo Alto, CA, Eletric Power Research Institute, 1978 (EPRI-NP-565, Project 709).

(14) BREIT, G. & WIGNER,E. Capture of slow neutrons. Phys. Rev. , 49: 519 ,1936 .

(15) CROFF,A.G. ORIGEN2: a revised and updated version of Oak Ridge isotope generation and depletion code. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., 1980 (ORNL-5621).

(16) DEUTSCH, R.W. Fission product buildup in enriched thermal reactor; Nucleonics, 14 (9):89-91, 1956 .

(17) DICKENS,J.K.;EMERY, J.F.;LOVE, T.A.;McCONNEL, j.W.; NORTH CUT, K.J.; PEELLE, R.W.; WEAVER, H. Fission product energy release of U235 between 2 and 1400 sec. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., Jan. 1980. (ORNL-NUREG-14).

(18) DRESNER, L. Resonance absorption in nuclear reactor New York, Pergamon, 1960 .

(19) DUDERSTADT; J.J. & HAMILTON L.J. Nuclear reactor analysis. New York, John Wiley,1975.

(20) ENGLAND, T.R. An investigation of fission product behavior and decay heating in nuclear reactor, Wisconsin 1962. (Ph.D. Thesis, University of Wisconsin).

(21) ENGLAND, T.R. CINDER: a point depletion and fission product program. Pittsburgh, PA, Bettis Atomic Power Lab., 1962 Rev. 1964. (WAPD-TM-334).

(22) ENGLAND, T.R. Time dependent fission product thermal and resonance absorption cross section. Pittsburgh, PA, Bettis Atomic Power Lab., 1965 (WAPD-TM-333)

(23) ENGLAND, T.R. & ECKERT, R.J. - A generalized treatment of fission product poisoning. Trans. Am. Nucl. Soc., 4 : 321 , 1961.

(24) ENGLAND, T.R. & HARRIS, D.R. Integral tests of fission product data files. Trans. Am. Nucl. Soc., 18:331-2, 1974.

(25) ENGLAND, T.R. & SCHENTER, R.E. ENDE/B-IV fission product files: summary of major data. Los Alamos, NM., Los Alamos Scientific Lab., 1975 (LA-6116-MS).

(26) ENGLAND, T.R. ; STAMATELATOS, M.G. Comparison of calculated and experimental delayed fission product beta and gamma spectra from U235 thermal fission. Los Alamos, N.M. , Los Alamos Scientific Lab., 1977. (LA-NUREG-6896-MS).

(27) ENGLAND, T.R. & WILSON, W.B. - TMI-2 decay power: LASL fission product and actinide decay power calculation for the president's Commission on the accident at Three Mile Island. Los Alamos ,NM, Los Alamos Scientific Lab., 1978, Rev. 1979. (LA-841-MS).

(28) ENGLAND, T.R. & WILSON, W.B. THI-2 radionuclide inventory and decay properties . Trans. Am. Nucl. Soc. 34: 787 , 1980.

(29) ENGLAND, T.R.; SCHENTER, R.E.; SCHIMITTROT, F. Integral decay heat measurements and comparison to ENDF/B-IV and ENDF/B-V . LA-7422-MS. Washington D.C. Nuclear Regulatory Commission, 1978. ( NUREG/CR-0305).

(30) ENGLAND, T.R.; SCHENTER, R.E.; WHITTEMORE, N.L. Gamma and beta decay power following U235 and Pu239 fission bursts. Los Alamos, NM, Los Alamos Scientific Lab., July 1975. (LA-6021-MS).

(31) ENGLAND, T.R.; WILCZYNSKI, W.; WHITTEMORE, N.L. CINDER-7 ; an interim users report. Los Alamos, NM, Los Alamos Scientific Lab. 1975. (LA-5885-MS).

(32) ENGLAND, T.R.; WILSON, W.B.; STAMATELATOS, M.G. - Fission product data for thermal reactors Part I: A data set for EPRI-CINDER using ENDF/B-IV , Palo Alto, CA, Electric power Research Inst., 1976. (EPRI-NP-356) .

(33) FERGUSON, R.L. & O'KELLEY, G.D. - A survey and evaluation of U233 fission yield data , Oak Ridge, TN , Oak Ridge National Laboratory, 1962. (ORNL-3305).

(34) FESHBACH, H. & WEISSKOPF, V.F. A Schematic theory of nuclear cross sections ; Phys. Rev , 76: 1550 , 1949 .

(35) FOSTER, D.G. Jr; ENGLAND, T.R.; WHITTEMORE, N.L. Exponential series parameters for the decay of multigroup fission burst. New Mexico, NM, Air Force Weapons Laboratory, Nov. 1978 (AFWL-TR-78-4).

(36) FOWLER, T.B. & VONDY, D.R. Nuclear core analysis code : CITATION .Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab. 1971. (ORNL-TM-2496 Rev. 2).

(37) GALPERIN, A. Verification of aggregate fission product formulation in the WIMS code depletion calculations : Ann. Nucl. Energy. 8: 461-4, 1981.

(38) GARRISON, J.D. & ROOS, B.W. Fission product capture cross sections, Nucl. Sci. Eng. 12 : 115-34 , 1962 .

(39) GRAVES, H.W. Jr Nuclear fuel management. New York, Wiley , 1979.

(40) GREENE, N.M.; Ford III, W.E. ; LUCAS, J.C.; WHITE, J.E.; PETRIE, L.M.; WRIGHT, R.Q. AMPX-II: a modular code system for generating coupled multigroup neutron gamma-ray cross-sections libraries from data in ENDF format. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., 1978. (ORNL-TM-3706).

(41) GRIFFITHS, G.J. & PHILLIPS G.J. - Latrep users's manual ; Chalk River Ontario, Atomic Energy of Canada, 1971 (AECL-3657).

(42) GUIMARAES, L.N.F. Desenvolvimento do sistema HAMMER-ORIGEN-2 . Rio de Janeiro, jul. 1984. ( Dissertação Mestrado; Instituto Militar de Engenharia).

(43) GUNST, S.B.; CONNOR, J.C.; CONWAY, D.E.; Measurements and calculations of heavy isotopes in irradiated fuels of U233 fission product poisoning, 1974, WAPD-TM-1182

(44) HALSALL, M.J. & TAUBMAN, C.J. The 1981 WIMS nuclear data library, Winfrith, UKAEA Atomic Energy Establishment Sept. 1983. (AEEW-R-1442).

(45) HEIJBOER, R.J. & JANSSEN, J. - Pseudo fission products cross sections for fast breeder reactor. Petten, Stinchting Energieonderzoek Centrum, 1976. (ECN-11).

(46) HOFFMAN, A.; PIERRE, J.P.; KAVENOKY, A.; LIVOLANT, M.; LORAIN, H. APOLLO : code multigroupe de resolution de l'equation du transport pour les neutrons thermiques et rapides, Gif-sur-Yvette, Saclay Centre d'Etudes Nucleaires, March, 1973. (CEA-N-1610) .

(47) HONECK, H.C. THERMOS: a thermalization transport code for reactor lattice calculations . Nucl. Sci. Eng. 8: 193, 1960.

(48) HONECK, H.C. & FINCH, D.R. FLANGE-II (Version 71-1). a code to process thermal neutron data from an ENDF-B tape. Aiken, SC, Savannah River Lab., 1971. (DP-1278).

(49) INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. Fission product nuclear data: proceedings of the 2nd advisory group meeting held in Petten 5-9, Sept. 1977. Vienna 1978. v.1,2. (IAEA-213).

(50) KATCOFF, S. Fission product yields from neutron induced fission , Nucleonics 8:201-8, 1960.

(51) KIKUCHI, Y.; HASEGAWA, A.; NISHIMA, H.; TASAKA, K. Fission product fast reactor constants systems of JNDC. Tokyo, Japan Atomic Energy Research, Nov. 1976. (JAERI-1248) .

(52) KOPPEL, J.U. & HOUSTON, D.H.; Reference manual for ENDF thermal scattering data, General Atomic report, (GA-8774), 1968.

(53) KUHN,W.R.G. & NIEMAN,E.G. Importance of fission nuclear data in life science, agriculture and industrial technologies. In: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY.Fission product nuclear data:proceedings held in Bologna 26-30 nov. 1973. Vienna 1974. v.1,p. 225-30.(IAEA-169).

(54) LABAUVE,R.J.; ENGLAND,T.R.; GEORGE,D.C.; MAYNARD,C.W. Fission product analytic impulse source functions . Nuc. Technol. , 56: 322-39, 1982.

(55) LABAUVE,R.J.; ENGLAND,T.R.; GEORGE,D.C.; STAMATELATOS,M.G. The application of a library of processed ENDF/B-IV fission product aggregate decay data in the calculation of decay energy spectra. Los Alamos, NM,Los Alamos Scientific Lab., 1978 ( A-7483-MS).

(56) LAMARSH, J.R. Introduction to nuclear reactor theory . New York, Addison-Wesley, 1966.

(57) LANE,F.E. FISSPROD a G-20 computer program. Chalk River, Ontario, Atomic Energy of Canada, 1969 (AECL-3038).

(58) LATHROP, K.D. TWOTRAN : a fortran program for two-dimensional transport. San Diego, CA, Gulf General Atomic, 1987. (GA-8747).

(59) LIAW, J.R. & HENRYSON II,H. - Lumped fission product neutron cross sections basead on ENDF/B-V for fast reactors analysis . Nucl. Sci. Eng. , 84: 324-36, 1983 .

(60) LUDEWIG, H.;DURSTON,C.;ATEFI, B.;CERBONE,R.J. Fast mixed spectrum reactor progress report results of EMSR benchmark calculations and assessment of current fission product libraries. Upton, N.Y, Brookhaven national Lab.,1980.(BNL-51237).

(61) MACFARLANE, R.E ; MUIR, D.W; BOICOURT, R.M. The NJOY nuclear data processing system. vol.1 user's manual. Los Alamos NM, Los Alamos Scientific Lab., 1982 (LA-9303-M).

(62) NEPHEW, E.A. Thermal and resonance absorption cross sections of U233, U235 and Pu239 fission product. Oak Ridge ,TN, Oak Ridge National Laboratory, 1960.( ORNL-2869).

(63) Neutron cross sections. Upton, NY, Brookhaven National Laboratory, Sigma Center, 1955.(BNL-325).

(64) NORDHEIN, L.W. & KUNIUR, G.F. A program of research and calculations of resonance absorption. San Diego, CA., Gulf General Atomic, 1961. (GA-2527).

(65) OKAZAKI, A; DURHAM, R.W.; LOUNSBURY, M. Neutron absorption cross-section of gross fission products of U233, U235 and Pu239. Chalk River Ontario, Atomic Energy of Canada, 1965. (AECL-2510).

(66) OKAZAKI, A. & SOKOLOWSKI, E.K; Redetermination of thermal neutron absorption cross sections of gross fission products of U233, U235 and Pu239 In: proceedings of a conference on..., Helsinki, 15-19 June 1970. v.1 Nuclear data for reactors.

(67) ONO, S. & CORCUERA, R.P. Produtos de Fissão Condensados In: FÍSICA de reatores: 5 encontro nacional de ..., realizado no Rio de Janeiro 10-12 abril 1985.v.1, p.121-7 .

(68) ONUSIC, J. Jr Possibilidades teóricas de cálculo do programa de computação HAMMER .São Paulo, IPEN/CNEN, 1978. (Dissertação de Mestrado).

(69) PHILLIPS, G.J. & GRIFFITHS, J. Latrep user's manual. Chalk River, Ontario, Atomic Energy of Canada, Sep. 1971. (AECL-3857).

(70) RALL, L.B.; Computational solution of nonlinear operator equation. New York, Wiley, 1960.

(71) Research reactor core conversion from the use of highly enriched uranium to the use a low enriched uranium fuels guide book, Vienna 1980, (IAEA-TECDOC-233)

(72) RHOADES, W.A. Version DOT 3.5 : two dimensional discrete ordinates transport code. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab., Sept. 1973. (ORNL-TM-4280).

(73) ROBB, W.L.; SAMPSON, J.B.; Stehn, J.R.; Davidson, J.K. - Fission product buildup in low burning thermal reactors. Nucleonics 13(12):30-3, 1955.

(74) SAKATA, H.; NAGAYAMA, H.; OTAKE, T. ; Group constants of fission product for thermal reactor. final report of E.P. Working group. Tokyo, Japan Atomic Energy Research Inst., 1973. (JAERI-1226) .

(75) SANTOS, A. A differential approach to sensitivity of transmutation analysis problems Madison, 1984. (PHD Thesis; University of Wisconsin).

(76) SANTOS, A & LOPEZ, E.M.; AMPXR e BRDROL : dois módulos novos para o sistema NJOY; Submetido a publicação no IPEN/CNEN.

(77) SCHENTER, R.E. Fission product and actinide data evaluations for ENDF/B-IV. Trans. Am. Nucl. Soc. 28:738-9, 1978.

(78) STAMATELATOS, M.G. & ENGLAND, T.R. Fission product gamma ray and photoneutron spectra and energy integrated sources. Los Alamos, NM., Los Alamos Scientific Lab., Dec. 1976. (LA-NUREG-6345-MS).

(79) STEHN, J.R.; GOLDBERG, M.D.; WIENERCHASMAN, R.; MUGHABGHAB, S.F.; MAGURNO, B.A.; MAY, V.M. Neutron cross sections. 2ed. Upton, NY, Brookhaven National Lab., Feb. 1965. v.3, Suppl.2. (BNL-325).

(80) STUART, M.R. & ENGLAND, T.R. Time dependent fission product poisons in U235 and natural uranium fuels. Trans. Am. Nucl. Soc. 15: 368., 1962.

(81) TAKANO, H.; IHARA, H.; AKIE, H. - Group Cross Sections of Fission Products and Minor Actinides In: NAKAGAWA, T. & ASAMI, T. eds. Nuclear data: proceedings of the 1986 seminar held in Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki ken. Nov. 26-27, 1986., Tokyo, JAERI, Feb. 1987. p121-54. (JAERI-M-87-025).

(82) TIJIMA, S. & YOSHIDA, T. Fission product model for BWR lattice calculation code, J. Nucl. Sci. Technol.; 19(2) : 96-106, 1982.

(83) WALKER, W.H. - Fission product absorption in Thermal Reactors In: INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. Nuclear data microscopic cross-section and others data basic for reactors: proceedings of a conference on ... held in Paris, 17-21 Oct. 1966. v.1 Nuclear data for reactors. Vienna 1967. p.521

(84) WALKER, W.H. Fission product data for thermal reactors. Part 1 Cross-Sections. Chalk River Ontario, Atomic Energy of Canada, 1969 (AECL-3037).

(85) WALKER, W.H. FISSPROD-2: an improved fission product accumulation program. Chalk River, Ontario, Atomic Energy of Canada, 1975 (AECL-5105).

(86) WEINBERG, A.M. & WIGNER, E.P. The physical theory of neutron chain reactor. Chicago, Univ. of Chicago, 1958.

(87) WESCOTT, W.H. Effective cross section values for well-moderated thermal reactor spectra. Chalk River Ontario, Atomic Energy of Canada, 1960 (AECL-1101).

(88) WIGNER, E.P. & WILKINS, J.K. Effect of temperature of the moderator on the velocity distribution of neutron with numerical calculations for hydrogen as moderator. Oak Ridge, TN, Oak Ridge National Lab. sept. 1948. (AECD-2275).

(89) WILSON, W.B.; ENGLAND, T.R.; LABAUVE, R.J.; BATTAT, M.E.; WESSOL, D.E.; PERRY, R.T. - Status of cinder and ENDF/B-V based libraries for transmutation calculations In: NUCLEAR waste transmutation proceedings of the International Conference on ..., held in Austin, TX, July 22-24, 1980. (LA-UR-82-2107).

(90) WILSON, W.B. & ENGLAND, T.R.; OZER, O.; WESSOL, D.E. Actinide decay power. Trans. Am. Nucl. Soc. 32: 737, 1979.

(91) WILSON, W.B.; ENGLAND, T.R.; STAMATELATOS, M.G.; LABAUVE, R.J. - ENDF/B-IV fission product cross-sections: absorption buildup in thermal reactor. Trans. Am. Nucl. Soc. 26: 592, 1972.

(92) WILSON, W.B.; ENGLAND, T.R.; LABAUVE, R.J.; BOICOURT, R.M.; TOAFEW a multigroup cross section collapsing code and library of 154 group processed ENDF/B-V fission product and actinide cross section. Palo Alto, CA, Electric Power Research Institute, 1982. (EPRI-NP-2343).

(93) WILSON, W.B.; ENGLAND, T.R.; LABAUVE, R.J.; BATTA, M.E.; WESSOL, D.E.; PERRY, R.T.; Status of CINDER and ENDF/B-V based libraries for transmutation calculations, IN :Proc. conf. waste transmutation; Austin, TX; July 22-24, 1980 (March 1981), p.673.