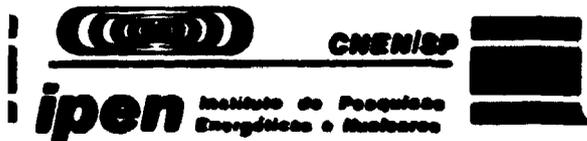


BR 9431668
INIS-BE -- 3214



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

MÉTODOS COMPUTACIONAIS PARA A ANÁLISE DE PROBLEMAS DE CRITICALIDADE NUCLEAR

MAURICIO GENTA MARAGNI

Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do
Grau de Mestre em Tecnologia
Nuclear.

Orientador: Dr. João Manoel Losada Moreira

**São Paulo
1992**

**INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

**MÉTODOS COMPUTACIONAIS PARA A ANÁLISE
DE PROBLEMAS DE CRITICALIDADE NUCLEAR**

MAURICIO GENTA MARAGNI



Dissertação apresentada ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Tecnologia Nuclear.

Orientador: Dr. João Manoel Losada Moreira

**São Paulo
1992**

"Amigo é coisa pra se guardar
no lado esquerdo do peito
mesmo que o tempo e a distância digam não
mesmo esquecendo a canção
o que importa é ouvir
a voz que vem do coração"

Milton Nascimento

A meus pais, Hélio e Amélia.
A minha esposa, Elisabeth.

AGRADECIMENTOS

A Coordenadoria para Projetos Especiais (COPESP) do Ministério da Marinha, na pessoa de seu Presidente, Dr. Othon Luiz Pinheiro da Silva, pelo fornecimento das instalações, equipamentos e apoio financeiro.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares da Comissão Nacional de Energia Nuclear (IPEN/CNEN-SP) na pessoa de seu Superintendente, Dr. Spero Penha Morato, pelo fornecimento das instalações, pelos cursos de Pós-Graduação oferecidos e pela bolsa de estudos concedida durante a fase inicial de realização deste trabalho.

Ao Prof. Dr. João Manoel Losada Moreira, meu orientador, pelo trabalho de assistência e orientação dispensado durante todo o desenvolvimento deste trabalho. Muito obrigado por todos os incentivos e pela dedicação, que foi fundamental nas etapas finais.

Ao Dr. Gilberto Gomes de Andrade, Chefe do Departamento de Sistemas Nucleares da COPESP, pelo suporte concedido.

Ao Prof. Dr. José Messias de Oliveira Neto, Chefe da Divisão de Engenharia de Segurança Nuclear da COPESP, pela oportunidade dada para a conclusão deste trabalho.

Ao Prof. Dr. Antonio Teixeira e Silva, Chefe da Seção de Análise de Acidentes da COPESP, pelo apoio e compreensão na fase final desta dissertação.

Ao Prof. Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite e à Profa. Dra. Nanami Kosaka pela participação com os membros da banca examinadora da defesa da dissertação, e ao Prof. Dr. Artur da Cunha Menezes Filho pelas sugestões dadas na suplência da banca examinadora.

Ao Prof. Dr. José Rubens Maiorino, pelas importantes sugestões dadas no decorrer deste trabalho, pela participação na banca examinadora do seminário de área e pela participação como suplente na banca examinadora da defesa da dissertação.

Aos amigos Carlos Roberto Ferreira e Leda Cristina Fanaro, pelo apoio técnico, revisão e importantes discussões proporcionadas em todas as fases deste trabalho, e a Adimir dos Santos e Alfredo Y. Abe, pelos conselhos e sugestões.

Aos amigos Gelson, Lúcia, Luiz e Edilson, pelo suporte computacional e pela dedicação demonstrada em todos os momentos requisitados.

Aos companheiros das divisões que trabalhei, muito particular, Mai, Marcelo, Hélio Yoriyaz, Gilson, Miriam, Margareth, Mitsuo, Rossini, Roberto Longo, Gaiané, Thadeu, Simone, Peter, Adriano e Gilberto.

Aos companheiros e amigos que estiveram mais próximos nos principais momentos da graduação e do mestrado: Leonidas Sandoval Junior, Marco Antonio Rodrigues Fernandes, Iza Melão, Almir Fernandes e Antonio Belchior Junior.

A minha esposa, Elisabeth de Castro Caparelli Maragni, pelo apoio e incentivo em todas as etapas deste trabalho.

Aos meus pais, Hélio Maragni e Amélia Genta Maragni, pelo carinho e dedicação demonstrado em todas as etapas de minha vida. Sem o apoio que vocês me deram, seria impossível chegar onde estou. A vocês dedico este trabalho. Muito obrigado por tudo.

Aos meus irmãos, Murilo e Mônica, que, de forma indireta, também me ajudaram bastante.

A todos enfim, que direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho, e cujos nomes injustamente omito.

MÉTODOS COMPUTACIONAIS PARA A ANÁLISE

DE PROBLEMAS DE CRITICALIDADE NUCLEAR

MAURICIO GENTA MARAGNI

RESUMO

A realização de uma análise de segurança quanto à criticalidade nuclear requer a utilização de uma metodologia qualificada. Este trabalho consiste em testar metodologias computacionais baseadas nos códigos KENO-IV e MCNP visando a qualificação dos métodos no IPEN-CNEN/SP e COPESP. Foram feitos testes de sensibilidade em diversos parâmetros de ambos os códigos, que mostraram ser apropriados para a análise de criticalidade de vários sistemas desde que sejam tomadas algumas precauções. Para o KENO-IV, a biblioteca Hansen-Roach forneceu os melhores resultados para sistemas rápidos e epitérmicos, enquanto que a do GAMTEC-II foi mais eficiente para sistemas térmicos. A opção albedo diferencial e a opção de reflexão automática mostraram um grande potencial para a análise de refletores com espessura infinita e finita, respectivamente. Para o MCNP, que foi utilizado pela primeira vez no instituto para análise de criticalidade, é fundamental a utilização de seções de choque contínuas em sistemas rápidos. Para os demais sistemas pode-se usar um conjunto discreto. Além disso, a utilização de uma técnica de redução de variância é fundamental para reduzir o tempo de computação, e várias delas são analisadas neste trabalho. Como exemplo de aplicação da metodologia, fez-se a análise de segurança quanto à criticalidade dos cofres de estocagem de combustível irradiado do IEA-R1, que mostrou que o MCNP é mais adequado para a análise de problemas com geometria complexa, e que o KENO-IV superestima o fator efetivo de multiplicação se não for utilizada a opção de geometria generalizada.

COMPUTATIONAL METHODS FOR NUCLEAR

CRITICALITY SAFETY ANALYSIS

MAURICIO GENTA MARAGNI

ABSTRACT

Nuclear criticality safety analyses require the utilization of methods which have been tested and verified against benchmarks results. In this work, criticality calculations based on the KENO-IV and MCNP codes are studied aiming the qualification of these methods at the IPEN-CNEN/SP and COPESP. For the KENO-IV code, the Hansen-Roach cross section library produced the best results for fast and epithermal systems, while GAMTEC-II code was more efficient for thermal systems. For reflectors it is shown that the differential albedo and automatic reflection options are more appropriate for infinite and finite reflectors, respectively. For the MCNP code, the use of continuous cross sections is fundamental for fast systems. For other cases, a discrete library is adequate. The utilization of variance reduction techniques is important to reduce the computer execution time, and several of them are analyzed. As a practical example of the above methods, a criticality safety analysis for the storage tubes for irradiated fuel elements from the IEA-RI research reactor has been carried out. This analysis showed that the MCNP code is more adequate for problems with complex geometries, and the KENO-IV code shows conservative results when it is not used the generalized geometry option.

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR/SP - IPEN

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1 - Diagrama genérico de um ciclo do combustível nuclear	5
Figura 2 - Diagrama simplificado para o cálculo de K_{EF} pelo Método de Monte Carlo Análogo	30
Figura 3 - Esfera de aço preenchida por uma solução aquosa homogênea de $Pu(4,66)(NO_3)_4 + U(0,66)O_2(NO_3)_2$ e refletida com água	47
Figura 4 - Arranjo 2x2x2 não refletido de cilindros de urânio metálico com enriquecimento de 93,2 wt% refletidos ou não com parafina	50
Figura 5 - Esfera de alumínio preenchida por uma solução de nitrato de uranila dissolvido em água	57
Figura 6 - Célula unitária para o elemento combustível padrão americano do reator IEA-R1	63
Figura 7 - Vista em corte de um dos cofres de estocagem de combustível irradiado do IEA-R1 com raio de 10,5 cm	65
Figura 8 - Arranjo esquemático dos 50 cofres de estocagem de combustível irradiado do IEA-R1	71
Figura 9 - Seção radial do elemento combustível padrão americano	72
Figura 10 - Seção axial de uma das placas combustíveis	72
Figura 11 - Vista em corte de um dos cofres de estocagem com raio de 8,0 cm	74
Figura 12 - Células unitárias consideradas pelos códigos MCNP e HAMMER-TECHNION	74
Figura 13 - Listagem dos dados de entrada requeridos para o KENO-IV	92
Figura 14 - Listagem dos dados de entrada requeridos para o MCNP	92

LISTA DE TABELAS

	Pág.
Tabela 1 - Normas de segurança quanto à criticalidade nuclear desenvolvidas pela ANS	9
Tabela 2 - Normas de criticalidade nuclear em fase de preparação pela ANS	10
Tabela 3 - Fatores de segurança para sistemas homogêneos e heterogêneos	14
Tabela 4 - Cartões de superfície para o MCNP	45
Tabela 5 - Concentrações críticas dos nuclídeos que aparecem na solução aquosa homogênea de $Pu(4,66)(NO_3)_6 + U(0,66)O_2(NO_3)_2$ (Figura 3)	48
Tabela 6 - Comparação entre algumas opções de reflexão do KENO-IV para o sistema mostrado na Figura 3	48
Tabela 7 - Concentrações atômicas dos nuclídeos envolvidos no arranjo 2x2x2 de cilindros de urânio metálico (Figura 4)	51
Tabela 8 - Comparação entre os resultados fornecidos pelos códigos para o sistema mostrado na Figura 4 com pequena reflexão externa (sistema rápido)	53
Tabela 9 - Comparação entre os resultados fornecidos pelos códigos para o sistema mostrado na Figura 4 com grande reflexão externa (sistema epitérmico)	54
Tabela 10 - Concentrações atômicas dos nuclídeos que aparecem nas soluções aquosas de nitrato de uranila (Figura 5)	57
Tabela 11 - Comparação entre os resultados para sistemas térmicos (Figura 5)	59
Tabela 12 - Comparação entre os fatores de multiplicação para sistemas térmicos (Figura 5)	60
Tabela 13 - Resultados obtidos com o HAMMER-TECHNION para a determinação da moderação ótima com e sem fuga de nêutrons para a célula da Figura 6	63
Tabela 14 - Espectro de nêutrons obtido nos cálculos celulares com o HAMMER-TECHNION para a célula da Figura 6	64
Tabela 15 - Composição média de um solo com 10% de água	67
Tabela 16 - Resultados obtidos de acordo com o interstício utilizado	68
Tabela 17 - Resultados finais obtidos na análise de criticalidade	78

	Pág.
RESUMO	v
ABSTRACT	vi
LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE TABELAS	viii
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - CRITICALIDADE NUCLEAR	4
2.1 - Aspectos Teóricos	6
2.2 - Acidentes de Criticalidade	7
2.3 - Normas e Critérios de Segurança	9
2.3.1 - Limites Subcríticos para a Segurança quanto à Criticalidade	12
2.3.2 - Cuidados Especiais na Análise de Criticalidade	14
2.4 - Metodologia de Análise	15
2.4.1 - Métodos Experimentais	16
2.4.2 - Métodos Analíticos	17
2.4.3 - Métodos Computacionais	19
2.4.3.1 - Teoria da Difusão	19
2.4.3.2 - Teoria de Transporte	20
CAPÍTULO 3 - MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO A PROBLEMAS DE TRANSPORTE DE NÉUTRONS	24
3.1 - Método de Monte Carlo Análogo	28
3.2 - Técnica dos Pesos Estatísticos	31
CAPÍTULO 4 - CÓDIGOS COMPUTACIONAIS PARA A ANÁLISE DE CRITICALIDADE	34
4.1 - O Código KENO-IV	34
4.1.1 - Outros Códigos da Série KENO	36
4.2 - O Código MCNP	38
4.2.1 - Cálculo de Criticalidade com o MCNP	41
4.3 - O Pacote Geométrico do KENO-IV e do MCNP	43

CAPÍTULO 5 - AVALIAÇÃO DOS PROGRAMAS PARA A ANÁLISE DE DIVERSOS SISTEMAS	46
5.1 - Tratamento de Refletores	46
5.2 - Comparação com Sistemas Rápidos e Epitérmicos	49
5.3 - Comparação com Sistema Térmicos	56
CAPÍTULO 6 - GERAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE E INTERAÇÃO ENTRE AS UNIDADES DE UM SISTEMA	62
6.1 - Geração de Seções de Choque com Moderação Ótima	62
6.2 - Considerações sobre a Interação entre as Unidades de um Sistema	64
6.3 - Seções de Choque que Representam Concreto, Terra, Ar e Água	67
CAPÍTULO 7 - APLICAÇÃO DA METODOLOGIA PARA OS COFRES DE ESTOCAGEM DE COMBUSTÍVEL IRRADIADO DO IEA-RI	69
7.1 - Descrição do Problema	70
7.2 - Metodologia de Análise com o Programa MCNP	73
7.3 - Resultados da Análise de Criticalidade	76
7.4 - Comparação com o KENO-IV	77
CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	80
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	85
APÊNDICE A - Dados de Entrada dos Códigos KENO-IV e MCNP para um Problema Simples	91

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Num processo de fissão nuclear ocorre a liberação de energia, fragmentos de fissão, nêutrons e radiações. O processo de fissão possui como característica a grande energia liberada por reação e os nêutrons emitidos, que mantêm uma reação em cadeia auto-sustentável. Os reatores nucleares são especialmente projetados para produzir e aproveitar a energia proveniente da fissão através do controle da reação em cadeia, possuindo sistemas de engenharia para conter a radiação e a liberação de produtos de fissão para o ambiente. Operações com materiais físséis fora do núcleo do reator devem evitar a reação de fissão em cadeia auto-sustentada. Uma inadvertida reação em cadeia nestas condições pode ser bastante danosa, já que não se prevê nenhum sistema para conter a energia, os produtos de fissão e a radiação emitida.

A segurança quanto à criticalidade nuclear consiste na prevenção de uma inadvertida reação nuclear em cadeia em ambientes externos ao núcleo do reator, através de uma análise que deve ser feita em todos os sistemas e procedimentos utilizados no manuseio e armazenagem de materiais físséis. A análise de criticalidade consiste basicamente em determinar o fator efetivo de multiplicação do sistema sob as mais adversas situações a que ele possa ser submetido. Esta análise irá dizer se uma dada configuração geométrica ou um dado procedimento é seguro ou não, isto é, se o fator efetivo de multiplicação é menor que 1. Dessa forma, tal análise pode aprovar ou inviabilizar um projeto de equipamento, indicando as mudanças que devem ser realizadas para que ele possa ser aceito.

As primeiras preocupações com a segurança quanto à criticalidade nuclear surgiram com o projeto e operação das plantas "Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant" e "Hanford Chemical Processing Plant", que faziam parte do Projeto Manhattan. Estas plantas eram secretas, e um substancial grau de conservantismo foi incorporado a fim de evitar a

criticalidade accidental. O aumento da demanda nestas e em outras plantas levará à condução de vários experimentos críticos tão logo tornaram-se disponíveis urânio enriquecido e plutônio. A necessidade de correlacionar dados experimentais com a teoria, e transportar ambos para a prática nas plantas nucleares, forneceu o estímulo para a formação dos primeiros especialistas em criticalidade nuclear.

Vários trabalhos foram realizados nesta área no decorrer dos tempos [2,3,4,10]. Um trabalho mais recente [1] traz uma compilação de tudo o que foi feito anteriormente e inclui as novas formulações (até a data de sua publicação) para as diversas técnicas e procedimentos utilizados na análise de criticalidade.

Para realizar uma análise de criticalidade necessita-se de uma metodologia que deve ser embasada em vários processos de qualificação e na experiência de seus executores. A fim de fornecer subsídios para esta análise, este trabalho possui os seguintes objetivos:

- a) Fornecer um embasamento teórico do problema e das técnicas utilizadas na análise de problemas de criticalidade nuclear;
- b) Desenvolver uma metodologia computacional qualificada para ser aplicada nas mais diversas formas, enriquecimentos e composições dos diversos sistemas encontrados no ciclo do combustível nuclear envolvendo U-235;
- c) Aplicar esta metodologia num problema real e compará-la com a metodologia usualmente utilizada nas instalações do IPEN-CNEN/SP e da COPESP.

A discussão teórica do problema encontra-se no Capítulo 2, e inclui os métodos utilizados numa análise de criticalidade. É dada ênfase ao Método de Monte Carlo, que é o principal método utilizado em criticalidade nuclear. O Capítulo 3 mostra, de forma simplificada, como a Equação de Transporte de Nêutrons é resolvida pelo Método de Monte

Carlo. É mostrado também como é feita a simulação da história dos nêutrons num sistema por este método. O Capítulo 4 fornece uma descrição detalhada dos códigos KENO-IV e MCNP, enfatizando os principais pontos envolvidos numa análise de criticalidade. Além disso, é fornecida uma breve descrição sobre outros códigos de criticalidade mais recentes e que ainda não são disponíveis no IPEN-CNEN/SP e na COPESP.

No Capítulo 5 é feita uma avaliação dos programas KENO-IV e MCNP para a análise de criticalidade de diversos sistemas. Tais sistemas são representativos dos comumente encontrados no ciclo do combustível nuclear, incluindo sistemas rápidos, epitérmicos e térmicos com U-235. Salienta-se que este trabalho marcou o início da utilização sistemática do MCNP no IPEN e na COPESP. Antes dele, apenas os casos amostra haviam sido executados. O Capítulo 6 faz algumas considerações sobre a forma correta de gerar seções de choque com moderação ótima. Além disso, são feitas também algumas considerações a respeito da análise de criticalidade de um arranjo com unidades interagentes. No Capítulo 7 é apresentada uma aplicação prática da metodologia desenvolvida. O problema utilizado corresponde à análise de criticalidade dos 50 cofres de estocagem de combustível irradiado do IEA-R1. A análise é feita preliminarmente com o MCNP. A seguir, o KENO-IV é utilizado com diversos conjuntos de seções de choque. Uma comparação entre os resultados mostra as vantagens e limitações de cada procedimento utilizado. Por fim, são apresentadas no Capítulo 8 as principais conclusões obtidas e recomendações sugeridas para realizar uma análise de criticalidade com os códigos KENO-IV e MCNP.

A maior dificuldade para a realização de um cálculo de criticalidade consiste na simulação geométrica do sistema a ser analisado. O Apêndice A fornece a listagem dos dados de entrada necessários para se realizar este cálculo com os códigos KENO-IV e MCNP. O mesmo problema é considerado nos dois casos a fim de ilustrar as dificuldades encontradas em tal simulação.

CAPÍTULO 2

CRITICALIDADE NUCLEAR

Uma situação de acidente durante o manuseio de materiais físséis numa das diversas etapas do ciclo do combustível nuclear pode causar o aparecimento de uma massa crítica fora do núcleo do reator, causando reações de fissão em cadeia e a consequente liberação de nêutrons e de outras radiações nocivas às pessoas e ao ambiente. A segurança quanto à criticalidade nuclear consiste numa série de normas e procedimentos que visam evitar a criticalidade accidental. Tais normas são conservativas, ou seja, garantem a subcriticalidade sob as mais adversas condições de concentração, enriquecimento de material fissil, moderação e reflexão que um sistema possa suportar. Neste contexto, este capítulo pretende fornecer alguns aspectos básicos requeridos para se fazer a análise de criticalidade de um sistema, incluindo os aspectos teóricos envolvidos e os critérios de segurança que devem ser adotados durante tal análise.

Os campos de aplicação da análise de criticalidade nuclear podem ser vistos na Figura 1, que mostra o diagrama de um ciclo do combustível genérico que envolve materiais de urânio e tório e reciclagem de U-233, U-235 e Pu-239 [1]. Nas etapas de mineração, moagem e processamento as preocupações quanto à criticalidade nuclear são pequenas, dado que o urânio natural só pode ter reação em cadeia auto - sustentável sob condições muito favoráveis de moderação e arranjo geométrico. A partir da etapa de enriquecimento as preocupações devem ser maiores. Se o enriquecimento for baixo, a criticalidade requer moderação por água. Com U-235 altamente enriquecido, U-233 ou Pu-239 a criticalidade é possível a seco.

Nas etapas de fabricação dos elementos combustíveis, bem como na estocagem destes em prateleiras, a análise de criticalidade deve ser feita assumindo os acidentes previsíveis de ocorrer (inundação por água, manuseio indevido, etc). O combustível irradiado no reator deve ser inicialmente estocado e manuseado embaixo da água para

fornecer resfriamento e blindagem. A manutenção de um espaçamento adequado entre conjuntos combustíveis também é requerida. A etapa de reprocessamento também requer muitos cuidados, pois nela encontram-se misturados elementos fisséis, férteis, produtos de fissão e rejeitos radioativos. Na estocagem final, apesar da preocupação com a criticalidade ser menor devido ao fato dos rejeitos radioativos possuírem baixa densidade físsil, o controle deve ser feito periodicamente.

As etapas onde os acidentes são previsíveis durante o transporte estão indicadas pelas linhas pontilhadas na Figura 1. Desse modo, cascos são especialmente projetados para cada forma de combustível, e devem considerar as várias possibilidades de acidente, como, por exemplo, mudança na geometria do sistema, inundação por água, fogo ou queda.

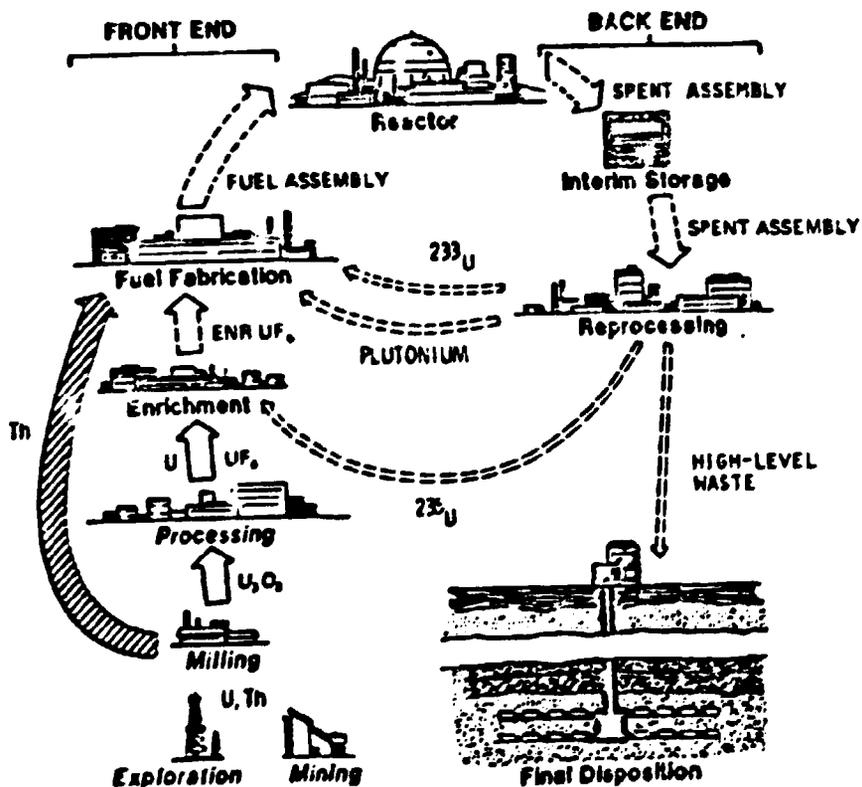


Figura 1: Diagrama genérico de um ciclo do combustível nuclear.

2.1 - ASPECTOS TEÓRICOS

O estado de uma reação em cadeia de nêutrons num sistema pode ser descrito em termos do fator efetivo de multiplicação, denominado K_{EF} , definido como:

$$K_{EF} = \frac{\text{taxa de produção de nêutrons via fissão}}{\text{taxa de perda de nêutrons}}$$

As três situações referentes ao K_{EF} de um sistema são:

$K_{EF} < 1 \longrightarrow$ sistema subcrítico

$K_{EF} = 1 \longrightarrow$ sistema crítico

$K_{EF} > 1 \longrightarrow$ sistema supercrítico

A criticalidade é alcançada em um sistema quando a taxa de produção de nêutrons via fissão no sistema for igual à taxa de perda de nêutrons por absorção e por fuga no sistema.

Em reatores nucleares, barras de controle e/ou veneno queimável são usados a fim de manter o balanço através da mudança no termo de absorção. Como o objetivo da segurança quanto à criticalidade nuclear é assegurar que operações com materiais fissionáveis fora do reator nuclear sejam sempre subcríticas, qualquer método que ofereça alguma combinação de baixa produção com alta absorção e fuga de nêutrons pode ser empregado.

Enquanto aproximadamente todos os nêutrons produzidos na fissão são liberados imediatamente (nêutrons prontos), uma fração dos nêutrons é emitida significativamente mais tarde. Esta fração é denominada β e varia de acordo com o isótopo que sofre fissão, sendo aproximadamente 0,7% para o U-235 e aproximadamente 0,3% para o Pu-239. Tais nêutrons atrasados são de importância predominante para controlar a reação em cadeia, pois a criticalidade depende da computação de todos os nêutrons liberados na fissão.

Em um sistema supercrítico o nível de potência aumenta exponencialmente com o tempo. A constante de tempo para este aumento depende da magnitude do afastamento da criticalidade ou reatividade ρ , que é definida como

$$\rho = \frac{K_{EF} - 1}{K_{EF}}$$

Quando ρ é muito menor que β , a escala de tempo dos nêutrons atrasados tende a dominar, resultando num aumento relativamente lento da potência (constante de tempo da ordem de segundos a minutos). Conforme ρ se aproxima da condição de pronto-crítico ($\rho = \beta$), menos nêutrons atrasados são requeridos para a criticalidade, e a potência aumenta com uma constante de tempo comparável com o tempo de geração dos nêutrons prontos (10^{-8} a 10^{-4} s). No caso de $\rho > \beta$, a constante de tempo tende a alcançar o tempo de geração dos nêutrons prontos, caracterizando uma excursão de potência de grandes proporções.

Uma excursão de potência devido a um estado do sistema bastante supercrítico é caracterizada por um pico de potência, podendo ou não ser seguida por outros picos de menor amplitude. Isto porque, com o aumento do nível de potência e da temperatura, os efeitos de realimentação (por exemplo, o alargamento Doppler das seções de choque de ressonância e a expansão do refrigerante/moderador) tendem a reduzir a multiplicação de nêutrons do sistema. Se a supercriticalidade ainda continuar, um desarranjo do sistema pode encerrar definitivamente a excursão após a liberação de muita energia e produtos radioativos.

2.2 - ACIDENTES DE CRITICALIDADE

A Segurança quanto à Criticalidade Nuclear é analisada com rigor devido às várias excursões de potência de supercriticalidade ocorridas no decorrer dos tempos. Conforme dito anteriormente, um acidente de criticalidade é caracterizado por um pulso de potência, que atinge um pico e depois começa a cair devido aos efeitos de realimentação.

A excursão é caracterizada pela potência máxima atingida, pelo tempo de duração do pulso, pela energia liberada (relatada em termos do número total de fissões) e pelas temperaturas atingidas no combustível.

O tamanho e a composição de um sistema determinam as características da excursão. Sistemas metálicos produzem pulsos de curta duração, porque a expansão e os mecanismos de transferência de calor são extremamente rápidos. Soluções tendem a ter pulsos mais largos. Se não ocorrer o desarranjo, pulsos adicionais ou a sustentação da criticalidade também são possíveis.

A referência 1 cita dois casos em que a criticalidade nuclear foi acidentalmente atingida durante medidas experimentais e oito casos de excursão em equipamentos de processos químicos. Estes casos são os únicos conhecidos durante manuseio ou processamento de materiais físséis em instalações nucleares, e englobam o período de 1945 a 1978. Os acidentes estão relacionados com problemas nos equipamentos, procedimentos inadequados, violação de normas ou uma combinação destes fatores. Eles tiveram como consequência 4 mortes, 26 pessoas com significativa exposição à radiação, nenhum dano aos equipamentos e perda desprezível de material físsil.

Várias lições foram aprendidas com estes acidentes. Todos os acidentes ocorridos nos processos químicos envolveram soluções de plutônio ou de urânio altamente enriquecido, enquanto que os acidentes ocorridos durante experimentos críticos foram devidos à imprudência dos técnicos. As soluções se caracterizam por menor massa crítica, maior mobilidade e forma variável de acordo com o recipiente, enquanto que os sólidos possuem maior massa crítica e seu movimento é mais aparente e mais facilmente controlado. Apesar dos acidentes com sólidos serem mais importantes, as soluções geralmente preocupam mais na análise de segurança quanto à criticalidade nuclear de sistemas com alto enriquecimento ou com plutônio. Para baixo enriquecimento (até 4 wt%), o material sólido é mais preocupante.

2.3 - NORMAS E CRITÉRIOS DE SEGURANÇA

A ANS (American Nuclear Society) tem desenvolvido várias normas para a segurança quanto à criticalidade nuclear. A Tabela 1 fornece uma relação com o nome e o título das normas desenvolvidas, sendo que uma breve descrição sobre cada uma delas pode ser encontrada na referência 1. A Tabela 2 apresenta a relação das normas de criticalidade em preparação pela ANS e que devem ser brevemente liberadas.

Tabela 1: Normas de Segurança quanto à Criticalidade Nuclear desenvolvidas pela ANS.

NOME	TÍTULO
ANS-8.1 - 1983	Nuclear Criticality Safety in Operations with Fissionable Materials Outside Reactors
ANS-8.3 - 1986	Criticality Accidents Alarm Systems
ANS-8.5 - 1986	Use of Borosilicate-Glass Rasching Rings as a Neutron Absorber in Solutions of Fissile Material
ANS-8.6 - 1983	Safety in Conducting Subcritical Neutron-Multiplication Measurements In Situ
ANS-8.7 - 1982	Guide for Nuclear Criticality Safety in the Storage of Fissile Materials
ANS-8.9 - 1987	Nuclear Criticality Safety Guide for Pipe Intersections Containing Aqueous Solutions of Enriched Uranyl Nitrate
ANS-8.10 - 1983	Criteria for Nuclear Criticality Safety Controls in Operations with Shielding and Confinement
ANS-8.12 - 1987	Nuclear Criticality Control and Safety of Homogeneous Plutonium-Uranium Fuel Mixtures Outside Reactors
ANS-8.15 - 1981	Nuclear Criticality Control of Special Actinide Elements
ANS-8.17 - 1984	Criticality Safety Criteria for the Handling, Storage, and Transportation of LWR Fuel Outside Reactors
ANS-8.19 - 1984	Administrative Practices for Nuclear Criticality Safety
ANS-8.20 - 1991	Nuclear Criticality Safety Training

Tabela 2: Normas de Criticalidade Nuclear em fase de preparação pela ANS.

NOME	TÍTULO
ANS-8.14	Use of Soluble Neutron Absorbers for Criticality Control
ANS-8.15	CPCV as a Neutron Absorber in Solutions of Fissile Material
ANS-6.12.1	Nuclear Criticality Control and Safety of Heterogeneous Plutonium-Uranium Fuel Mixtures Outside Reactors
ANS-8.16	Maximum Subcritical Limits for Slightly Enriched Uranium Compounds Processed in the LWR Fuel Cycle

A seguir são citados alguns conceitos básicos de segurança, que têm a finalidade de fornecer parâmetros para um efetivo controle de criticalidade para arranjos e unidades fisséis [1,2,3,4]:

- **Princípio da Dupla Contingência:** Este princípio requer que duas improváveis, independentes e concorrentes mudanças nas condições de processo ocorram antes da criticalidade ser possível. Quando este princípio é usado, um evento simples não pode levar à criticalidade. Um importante exemplo deste princípio pode ser encontrado nas instalações de fabricação de combustível para um LWR (Light Water Reactor). Como o urânio levemente enriquecido só pode ser crítico se apropriadamente moderado e refletido, a primeira contingência é uma completa inundação por água. Assim, ainda que inundado, uma adicional mudança independente, por exemplo, melhor rearranjo geométrico, deveria ser requerida para alcançar a criticalidade pelo princípio da dupla contingência.

- **Segurança Geométrica:** Quando um container ou parte de um equipamento não pode armazenar material fissionável suficiente para produzir a criticalidade independentemente do enriquecimento, concentração ou reflexão externa, ele é referido como sendo "geometricamente seguro". Em instalações ou sistemas em que apenas certos tipos de materiais fisséis são manuseados (por exemplo, nas instalações de fabricação de combustível de um LWR), um equipamento com geometria favorável pode ser definido com as

devidas restrições. Por outro lado, um equipamento que só é subcrítico para um determinado intervalo de concentrações não pode ser considerado seguro geometricamente.

- **Segurança pelo Controle do Grau de Moderação:** Quando um material moderador ou refletor é adicionado a uma composição fissionável a multiplicação de nêutrons do sistema pode aumentar. Moderadores e refletores podem aumentar a multiplicação de dois modos: retornando nêutrons que poderiam fugir do sistema ou reduzindo suas energias a níveis com probabilidade de fissão maior. Assim, através do estabelecimento e determinação do máximo grau de moderação ou reflexão que um sistema possa suportar sem ser crítico, e monitorando este parâmetro, pode-se assegurar o controle efetivo da criticalidade [5].

- **Segurança através de Absorvedores de Nêutrons:** A adição de substâncias absorvedoras de nêutrons como boro, cádmio ou gadolínio na forma sólida ou em solução é outro meio efetivo de controle de criticalidade. Enquanto que o envenenamento heterogêneo é relativamente insensível com respeito a perturbações, o uso de envenenamento homogêneo é problemático em meios multiplicativos devido às dificuldades em assegurar a distribuição uniforme dos absorvedores de nêutrons. Além disso, o simples ato de adicionar um reagente químico errado pode precipitar o veneno (absorvedor de nêutrons) e permitir a criticalidade. Desse modo, o conceito de segurança por absorvedores de nêutrons deve, sempre que possível, ser utilizado juntamente com outro conceito. Deve-se lembrar que apenas sistemas térmicos podem ser mantidos subcríticos com absorvedores de nêutrons, sendo requerida a monitoração da eficácia desses absorvedores regularmente.

- **Segurança pela Limitação da Massa:** Este conceito é utilizado com o princípio de duplicação de massa. Um sistema é seguro se num acidente a massa é dobrada e ainda assim a criticalidade não é atingida.

- **Segurança por Limitação na Concentração:** No caso de se limitar a concentração de material físsil, outro conceito também deve ser utilizado a fim de garantir a segurança quanto a criticalidade devido à susceptibilidade para situações de acidentes (precipitação, gradientes de concentração, cristalização). Além disso, o controle da concentração de material físsil é bastante complicado e sujeito a falhas.

- **Segurança por Limitação no Grau de Enriquecimento:** Em muitos casos é possível um efetivo controle de criticalidade de um sistema pelo estabelecimento do máximo grau de enriquecimento de material físsil que ele possa suportar. Outros fatores de segurança, por exemplo segurança geométrica, frequentemente se apoiam na limitação do grau de enriquecimento.

Vários limites subcríticos foram estabelecidos objetivando quantificar e garantir esses vários conceitos e princípios de segurança quanto à criticalidade. Na próxima seção estes limites serão tratados com maiores detalhes.

2.3.1 - LIMITES SUBCRÍTICOS PARA A SEGURANÇA QUANTO À CRITICALIDADE

Os limites subcríticos foram estabelecidos a fim de oferecer parâmetros para as operações nas instalações do ciclo do combustível. Um limite subcrítico é, por definição, um valor limitante atribuído a um parâmetro controlado e que mantém o sistema subcrítico por uma margem de reatividade suficiente para compensar incertezas nos cálculos e nos dados experimentais, considerando valores mais reativos possíveis para os demais parâmetros [4]. Dessa forma, os limites de operação das plantas reais são derivados a partir dos limites subcríticos, considerando a filosofia de dupla contingência para controle de criticalidade a fim de considerar possíveis contingências adversas.

O procedimento utilizado em cálculos de criticalidade consiste em começar com os valores mínimos dos parâmetros de criticalidade em condições de moderação ótima (ou seja, usando as concentrações que fornecem o maior fator de multiplicação infinito) e procurar trabalhar com sistemas geometricamente seguros. Se mais que um sistema de material fissil está presente, a interação entre os nêutrons também deve ser levada em consideração.

De maneira prática, é comum representar os limites subcríticos de acordo com os seguintes parâmetros críticos:

- o volume crítico de uma esfera;
- a massa crítica de uma esfera;
- o diâmetro crítico de um cilindro infinito;
- a espessura crítica de uma placa infinita;
- a menor concentração crítica dos materiais fissionáveis; e
- o menor grau de enriquecimento crítico.

Estes parâmetros críticos são dados em tabelas e gráficos [1,2,3,4,6] como função do material fissionável, composto químico, concentração ou grau de moderação e reflexão externa. A fim de considerar contingências adversas são introduzidos alguns fatores de segurança, que multiplicam estes valores em condições de razão de moderação ótima e reflexão infinita de água a fim de fornecer o máximo valor permitido para um dado parâmetro controlado. Deve ser notado, entretanto, que a escolha correta de um certo fator de segurança sempre pode ser feita considerando a probabilidade de exceder o limite e as possíveis consequências do evento. A Tabela 3 mostra os fatores de segurança para sistemas homogêneos e heterogêneos recomendados na referência [3].

Tabela 3: Fatores de segurança para sistemas homogêneos e heterogêneos.

Parâmetro	Sist.Homogêneo	Sist.Heterogêneo
Massa	0,45	0,45
Volume de Esfera	0,75	0,75
Diâmetro de Cilindro Infinito	0,85	0,85
Espessura de Placa Infinita	0,75	0,80
Concentração	0,50	
Grau de Enriquecimento	0,90	

2.3.2. - CUIDADOS ESPECIAIS NA ANÁLISE DE CRITICALIDADE

Na determinação dos valores críticos para um dado sistema e na derivação de valores seguros para operações e/ou estocagem deve-se ter em mente que as condições do processo podem sofrer alterações com o tempo, principalmente em processos químicos. A seguir são dados alguns exemplos típicos de contingências que podem ocorrer e devem ser consideradas na análise de segurança quanto à criticalidade nuclear:

- Aumento na quantidade de material físsil no processo devido a erros durante o manuseio ou duplicação acidental da massa;
- Aumento na densidade de materiais físséis devido a processos de evaporação ou sinterização;
- Mudanças no grau de moderação devido a incertezas na sua determinação, aumento na umidade do ar, reflexão devido a pessoas, evaporação ou remoção de moderado., precipitação de materias físséis, diluição de concentrados, etc;

- Mudanças nas formas geométricas e nas dimensões devido a incertezas nas tolerâncias de fabricação, danos de corrosão, rachaduras, deformação dos recipientes, etc;

- Mudanças na eficácia dos absorvedores de nêutrons devido a corrosão, perda de material absorvedor, perda de moderador causando um endurecimento do espectro, redistribuição de um absorvedor sólido em fraturas, precipitação ou evaporação de absorvedores homogêneos, etc;

- Mudança na eficácia de refletores devido a variação em sua espessura pela adição de material, mudança na composição do refletor, perda de absorvedor, etc; e

- Mudança na interação dos nêutrons com outros sistemas físséis ou com refletores devido a adição de novas unidades, adição de refletores, mudança no arranjo geométrico das unidades, transporte dos componentes, colapso de suportes e engradados de estocagem, etc.

2.4 - METODOLOGIA DE ANÁLISE

A análise de criticalidade de um sistema consiste em determinar os limites de operação a que ele deve ser submetido a fim de garantir a permanência do estado subcrítico sob as mais adversas condições. Para geometrias mais simples, os parâmetros de condições seguras podem ser obtidos através de tabelas e gráficos, considerando os fatores de segurança apropriados. Para geometrias mais complexas, como por exemplo, prateleiras de armazenagem, circuitos de tubulações contendo junções, etc, é necessário realizar cálculos computacionais. No restante deste capítulo p. pode-se abordar os métodos experimentais, analíticos e computacionais, a fim de mostrar as vantagens e desvantagens de cada um deles para a análise de segurança quanto à criticalidade nuclear.

2.4.1 - MÉTODOS EXPERIMENTAIS

Os dados obtidos através de experimentos críticos ou subcríticos são os mais importantes e valiosos para a determinação de limites subcríticos dos diversos sistemas encontrados no ciclo do combustível nuclear. Estes experimentos, que possuem composições bem definidas, dimensões precisas e geometrias regulares, constituem-se em experimentos "benchmarks" e são utilizados para validar códigos computacionais.

O procedimento padrão para experimentos críticos consiste em utilizar a técnica do inverso da multiplicação ($1/M$) [1]. Este método baseia-se no fato que uma dada fonte de nêutrons produz uma população de nêutrons de fissão que aumenta de acordo com o fator de multiplicação do material em que ela é colocada. A multiplicação de nêutrons num sistema é definida como a razão entre a taxa de produção de nêutrons via fissão e a taxa de produção de nêutrons via fonte externa. O inverso deste número vai para zero quando se aproxima da criticalidade. Usando este fato, é levantada uma curva de $1/M$ em função da massa ou volume de material físsil. A extrapolação da curva para zero prediz o carregamento crítico. Em geral, posiciona-se um detector no sistema e analisa-se o seu sinal. Neste caso, o inverso da multiplicação numa dada quantidade de material é calculado como a razão entre o sinal para uma quantidade inicial de material físsil tomada como referência e o sinal para a quantidade considerada. Vale salientar que a técnica do inverso da multiplicação também pode fornecer valiosas informações sem que a criticalidade seja alcançada.

Outro método utilizado em medidas críticas com sólidos é o "split table", que consiste em separar um arranjo de material fissionável em duas partes. O material pode ser colocado manualmente em mesas que são inicialmente separadas e em uma configuração subcrítica. Por fim, as duas metades são aproximadas remotamente até o sistema alcançar a criticalidade [1].

Recentemente vem sendo bastante utilizada a técnica baseada na flutuação da população neutrônica de um arranjo subcrítico bombardeado por uma fonte de nêutrons (técnica de ruído). A análise de Fourier do sinal de um detector permite estimar o nível de subcriticalidade do conjunto físsil [7].

2.4.2 - MÉTODOS ANALÍTICOS

Os métodos analíticos foram desenvolvidos a fim de simplificar o processo de estabelecimento de condições limitantes para o manuseio e estocagem de materiais físséis. A maior parte deles surgiu na década de 50, quando os experimentos consistiam na única fonte de informações existente. Atualmente eles fornecem uma primeira estimativa para as condições limitantes, antes de se seguir para cálculos mais detalhados.

Estes métodos são divididos em duas classes. Na primeira encontram-se os modelos semiempíricos, nos quais a criticalidade de um arranjo é descrita usando parâmetros do próprio arranjo e/ou das unidades que o constituem. Tais métodos descrevem arranjos com um grande número de unidades, e entre eles destacam-se o Método da Densidade Superficial [1,2,8,9], o Método da Densidade Análoga [1,2,3,8,9] e o Método NB_k^2 [1,3,8]. Na segunda classe encontram-se os modelos de interações das unidades do arranjo, nos quais se consideram as trocas de nêutrons entre as unidades para cálculos de criticalidade do arranjo. São modelos que descrevem arranjos com pequeno número de unidades, e entre eles destacam-se o Método do Ângulo Sólido [1,2,3,8] e o Método do Albedo [8]. Um outro método, denominado Método da Conversão do "Buckling" [1,10], determina condições limitantes para unidades através da comparação desta com esferas de mesmo volume a fim de fornecer informações conservativas a respeito da reatividade do sistema considerado.

O Método da Densidade Superficial é útil para grandes áreas ou situações em que a extensão de material físsil em uma direção é limitada ou controlada. Este método observa um arranjo em termos da densidade de material físsil obtida quando ele é projetado num plano de contorno. É feita então a comparação com a densidade de uma placa com a mesma composição de material físsil e que é crítica quando totalmente refletida por água. Dessa forma, o arranjo é dito subcrítico se sua densidade projetada for inferior à densidade da placa crítica refletida por água.

O Método do Ângulo Sólido é baseado no fato de quanto maior for o ângulo sólido subentendido com outras unidades, maior a probabilidade de um nêutron que sai de uma unidade interceptar outra unidade do arranjo e incrementar o K_{EF} do sistema. Ele considera uma unidade físsil de referência tendo sua multiplicação aumentada pelos seus vizinhos proporcionalmente ao ângulo sólido que eles subentendem. Deste modo, este método especifica um máximo ângulo sólido permitido para uma unidade com fator efetivo de multiplicação k_{EF} em relação a todas as outras unidades do arranjo. Um dado arranjo é julgado como sendo subcrítico se o ângulo sólido calculado for menor ou igual ao ângulo sólido permitido para cada unidade do arranjo. Em geral, uma unidade é usada como referência, sendo aquela que possui a mais limitante combinação de fator efetivo e ângulo sólido. Se esta unidade tiver um ângulo sólido menor que o permitido, o arranjo é considerado subcrítico. Deve-se tomar cuidados para se fazer a escolha certa ou então aplicar o método em mais de uma unidade.

Estes dois métodos foram selecionados por serem de grande importância para cálculos de criticalidade e por terem sido estudados com maior profundidade no decorrer deste trabalho. No entanto, outros métodos analíticos, bem como explicações mais detalhadas dos aqui mencionados podem ser encontrados nos artigos referenciados. Salienta-se que existem várias formulações diferentes para cada método analítico, sendo que as formulações mais recentes estão descritas na referência 2. Exemplos de aplicação do Método da Densidade Superficial e do Método do Ângulo Sólido são encontrados na referência 1, enquanto que a referência 10 fornece um exemplo de aplicação do Método da Conversão do "Buckling".

2.4.3 - MÉTODOS COMPUTACIONAIS

Nem sempre dados experimentais que estabelecem as condições de criticalidade para um certo sistema são disponíveis. Neste caso podem ser empregados alguns métodos numéricos em detrimento dos métodos analíticos descritos anteriormente, principalmente quando se trata de sistemas com geometria irregular. Os métodos numéricos ou computacionais fornecem resultados mais precisos e confiáveis, sendo que a importância deles aumentou com o advento dos computadores de alta velocidade de processamento. Com isto é possível fazer uma análise de criticalidade menos conservativa, com procedimentos computacionais qualificados substituindo experiências, e que podem ser aplicados numa grande variedade de composições reproduzindo os efeitos de todos os processos neutrônicos que ocorrem em sistemas reais. Os métodos geralmente utilizados em cálculos de criticalidade são os que utilizam a Teoria de Difusão e a Teoria de Transporte.

2.4.3.1 - TEORIA DA DIFUSÃO

Na Teoria de Difusão o problema de resolver a Equação de Transporte de Nêutrons é simplificado descrevendo a corrente líquida de nêutrons através da Lei de Fick:

$$\vec{J}(\vec{r}, E) = -D(\vec{r}, E) \nabla \phi(\vec{r}, E)$$

onde $\vec{J}(\vec{r}, E)$ é o vetor corrente líquida de nêutrons no ponto \vec{r} com energia E , $D(\vec{r}, E)$ é o coeficiente de difusão e $\phi(\vec{r}, E)$ é o fluxo escalar de nêutrons. Na Teoria de Difusão, a direção de movimento dos nêutrons não é tratada explicitamente, pois ela deve ser aplicada apenas em problemas onde a dependência angular do fluxo de nêutrons é pouco importante, ou seja, ela só é válida em problemas levemente anisotrópicos. Para aplicar este método, as seguintes condições devem ser satisfeitas:

- O sistema físico deve ser fracamente absorvedor, ou seja, $\Sigma_a \gg \Sigma_s$;
- Os gradientes dos fluxos de nêutrons em interfaces devem ser pequenos. Isto requer que o sistema não seja pequeno comparado com o livre caminho médio dos nêutrons no meio e que os materiais que compõem o sistema não sejam muito diferentes do ponto de vista neutrônico.

Estas condições são satisfeitas em alguns sistemas mais simples, o que geralmente não ocorre nos sistemas envolvidos em criticalidade nuclear, que possuem geometrias irregulares e meios muito diferentes. Programas computacionais que utilizam a Teoria de Difusão são o CITATION [11], o EXTERMINATOR-2 [12] e o 2DB [13].

2.4.3.2 - TEORIA DE TRANSPORTE

Uma descrição completa do comportamento dos nêutrons num dado sistema para uma análise de segurança quanto à criticalidade é obtida pela solução da Equação de Transporte de Nêutrons de Boltzmann, dada por:

$$\bar{\Omega} \cdot \nabla \phi(\bar{r}, E, \bar{\Omega}) + \Sigma_f(\bar{r}, E) \phi(\bar{r}, E, \bar{\Omega}) - \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \int_0^{\infty} dE' \Sigma_s(\bar{r}, E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \phi(\bar{r}, E', \bar{\Omega}') = \frac{\chi(E)}{4\pi K_{EF}} \int_0^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \nu \Sigma_f(\bar{r}, E') \phi(\bar{r}, E', \bar{\Omega}')$$

Os parâmetros desta equação seguem a notação típica da área de física de reatores. Em cálculos de criticalidade nuclear é feita a remoção da dependência temporal e a inclusão do autovalor K_{EF} , que fornece a informação sobre a criticalidade ou não do sistema.

A princípio, a equação de transporte poderia ser resolvida por procedimentos numéricos com o uso de seções de choque apropriadas e uma descrição geométrica do sistema. Porém, este procedimento nem sempre é prático, dada a complexidade das seções

de choque e das geometrias da maior parte dos sistemas reais. Dessa forma, simplificações e aproximações devem ser empregadas a fim de tornar o problema tratável. A solução de Equação de Transporte é implementada através do Método das Ordenadas Discretas e do Método de Monte Carlo, entre outros.

O Método das Ordenadas Discretas consiste em discretizar a variável angular em uma série de direções discretas (quadraturas angulares, com os respectivos pesos para aproximar as integrais da Equação de Transporte de Nêutrons). A variável espacial é tratada por um esquema de diferenças finitas e a variável energia pelo método multigrupo. A representação mais utilizada é a S_n , na qual a direção dos nêutrons provenientes de espalhamentos é determinada a partir da n-ésima ordem de expansão do fluxo angular de nêutrons.

Os custos e tempos de computação envolvidos nos cálculos são fatores limitantes para os números de grupos de energia, direções angulares e pontos na malha espacial. É comum usar-se códigos unidimensionais com seções de choque em poucos grupos de energia e uma aproximação angular de pequena ordem, como por exemplo o ANISN [14], o DTF-IV [15] e o XSDRN [16]. Estes códigos são recomendados para resolver problemas que são simples o bastante para serem representados numa geometria unidimensional, isto é, esferas, cilindros infinitos, placas infinitas e arranjos infinitos destas formas.

Os códigos de ordenadas discretas bidimensionais, tais como o DOT [17] e o TWOTRAN [18], embora mais poderosos e acarretarem um custo computacional elevado para a execução, ainda não conseguem representar exatamente as formas irregulares encontradas nos processos das instalações do ciclo do combustível nuclear com seus arranjos de malhas retangulares ou cilíndricas. Códigos tridimensionais desta linha apresentam problemas econômicos e de representação adequada da realidade ainda maiores que os observados para os programas bidimensionais [19].

O Método de Monte Carlo aplicado para resolver problemas de transporte de nêutrons consiste em traçar os percursos dos nêutrons individualmente, colisão por colisão, até serem eliminados por absorção ou fuga do sistema [20]. Cada evento ocorrido é descrito através de uma função densidade de probabilidade, que prediz com boa precisão o comportamento de um grande número de eventos. O destino do nêutron após cada colisão é determinado por parâmetros que caracterizam esta probabilidade, tais como seções de choque, espectro de energia e distribuições de espalhamento. Como o resultado de um evento é randômico, o Método de Monte Carlo seleciona um evento através de um número aleatório uniformemente distribuído entre 0 e 1. O resultado global do acompanhamento evento a evento da vida do nêutron (ou perseguição) é uma ótima aproximação do comportamento do sistema real.

A utilização deste método em problemas de transportes de nêutrons é incentivada pela capacidade de simular condições geométricas extremamente complexas nas quais estejam envolvidas uma ou mais unidades físséis. Num cálculo de criticalidade, os dados resultantes de uma dada perseguição são acumulados a fim de fornecer uma estimativa do fator efetivo de multiplicação do sistema, fluxo neutrônico e taxas de reação. A qualidade do resultado obtido irá depender basicamente do conjunto de seções de choque utilizado e da precisão na simulação geométrica, já que é sempre possível simular o caminho individual dos nêutrons pelos materiais sem se importar com complicações devido à forma irregular do sistema. O Método de Monte Carlo é especialmente apropriado para cálculos de segurança quanto à criticalidade nuclear, dado que ele permite uma representação precisa de unidades interagentes de materiais físséis, unidades diferentes ou de forma geométrica complexa, moderadores entre unidades e arranjos refletidos.

Enquanto que nos códigos de difusão e nos demais códigos de transporte um aumento no número de grupos de energia acarreta num aumento direto de tempo de computação e de espaço de memória requerido, nos códigos de Monte Carlo isto não ocorre. Nestes programas podem ser usadas seções de choque pontuais ou numa fina estrutura de multigrupos com pequeno aumento no tempo de computação, pois a única diferença está no tamanho da tabela a partir da qual os dados são escolhidos. Isto ocorre porque a técnica

de Monte Carlo resolve o problema apenas para as energias, posições e ângulos que o nêutron passou em sua vida, enquanto que nos outros métodos resolve-se o problema explicitamente em todo seu domínio. Os números aleatórios gerados por um computador são chamados de "pseudo-aleatórios", pois são obtidos de acordo com uma regra determinística. Porém, a sequência resultante é considerada randômica, pois possui as propriedades para substituir os números sorteados por acaso.

Vários códigos computacionais utilizam este método para as mais diversas aplicações. Dentre eles destacam-se os códigos da série KENO [21-25], o MORSE [26], o OSR [27], o MCNP [28] e o MONK [29].

O Método de Monte Carlo constitui-se na mais importante ferramenta para a análise de criticalidade. Dada a sua grande flexibilidade para a representação da geometria dos sistemas, é o método computacional que será aprofundado nesta dissertação para a análise de segurança quanto à criticalidade. Como estas análises consistem basicamente em determinar o fator efetivo de multiplicação de sistemas físeis, o Capítulo 3 mostra como o Método de Monte Carlo é utilizado para cálculos de criticalidade partindo da Equação de Transporte de Nêutrons na forma integral e chegando numa expressão simples para o cálculo do K_{eff} de um sistema.

MÉTODO DE MONTE CARLO APLICADO A PROBLEMAS
DE TRANSPORTES DE NÉUTRONS

Neste capítulo pretende-se mostrar como o Método de Monte Carlo pode ser utilizado a fim de resolver a Equação de Transporte de Nêutrons, e como simular a trajetória de uma partícula através de um meio material por este método. A preocupação aqui será derivar um procedimento para cálculos de criticalidade. Uma demonstração mais abrangente pode ser vista na referência [30].

Em cálculos de criticalidade, a equação de Boltzmann para transporte de nêutrons escrita na forma de multigrupos de energia tem a seguinte forma:

$$\bar{\Omega} \cdot \nabla \phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) + \Sigma_g^t(\bar{r}) \phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) = S_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) + \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} \Sigma_g^{g'}(\bar{r}, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \phi_{g'}(\bar{r}, \bar{\Omega}') d\bar{\Omega}' \quad (1)$$

onde

$$S_g(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \frac{\chi_g}{4\pi K_{EF}} \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} \nu \Sigma_f^{g'}(\bar{r}) \phi_{g'}(\bar{r}, \bar{\Omega}') d\bar{\Omega}' \quad (2)$$

$\phi_g(\bar{r}, \bar{\Omega})$ é o fluxo angular de nêutrons do grupo de energia g e os outros termos seguem a notação convencional da área de física de reatores.

Seja \bar{r} um ponto fixo no espaço e \bar{r}' um ponto arbitrário. Se o nêutron viaja de \bar{r}' para \bar{r} percorrendo uma distância R temos

$$\bar{r}' = \bar{r} - R\bar{\Omega} \quad (3)$$

onde $\bar{\Omega}$ é a direção de viagem do nêutron.

A derivada total do fluxo angular com respeito a R é dada por:

$$\frac{d}{dR} \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\partial x}{\partial R} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial R} \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial R} \frac{\partial \phi}{\partial z} = -\vec{\Omega} \cdot \nabla \phi(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (4)$$

Substituindo a Equação (4) na Equação (1) com $\vec{r} = \vec{r}'$, resolvendo a equação resultante utilizando o fator integrante

$$\exp \left(- \int_0^R \Sigma_t^g(\vec{r}-R'\vec{\Omega}) dR' \right)$$

e integrando dR de 0 a ∞ chegamos a:

$$\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^{\infty} dR \exp[-\beta_g(\vec{r}, R, \vec{\Omega})] \left[S_g(\vec{r}-R\vec{\Omega}, \vec{\Omega}) + \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_g^{g' \rightarrow g}(\vec{r}-R\vec{\Omega}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi_{g'}(\vec{r}', \vec{\Omega}') \right] \quad (5)$$

onde foi feita a suposição que não há fonte de nêutrons no infinito e foi introduzida a espessura óptica $\beta_g(\vec{r}, R, \vec{\Omega})$ definida como:

$$\beta_g(\vec{r}, R, \vec{\Omega}) = \int_0^R \Sigma_t^g(\vec{r}-R'\vec{\Omega}) dR' \quad (6)$$

Assim, o fluxo em \vec{r} , no grupo g e direção $\vec{\Omega}$ é devido à parcela de todos os nêutrons que surgiram em \vec{r}' com direção $\vec{\Omega}'$ no grupo g somada com a parcela referente aos nêutrons em \vec{r}' no grupo g' e direção $\vec{\Omega}'$ que são espalhados para o grupo g e direção $\vec{\Omega}$.

A densidade de partículas emergentes $\chi_g(\vec{r}, \vec{\Omega})$ é definida como a densidade de partículas saindo de uma fonte ou emergindo de uma colisão com coordenadas no espaço de fase (grupo g, \vec{r} , $\vec{\Omega}$), ou seja :

$$\chi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_g^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (7)$$

Assim, a Equação (5) pode ser escrita como:

$$\phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_0^{\infty} dR \exp[-\beta_g(\vec{r}, R, \vec{\Omega})] \chi_g(\vec{r}', \vec{\Omega}') \quad (8)$$

Substituindo a Equação (8) na Equação (7) obtemos:

$$\chi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_g^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \int_0^{\infty} dR \exp[-\beta_g(\vec{r}, R, \vec{\Omega}')] \chi_{g'}(\vec{r}', \vec{\Omega}') \quad (9)$$

Definindo o operador integral de transporte como:

$$T_g(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, \vec{\Omega}) \equiv \int_0^{\infty} dR \Sigma_g^g(\vec{r}') \exp[-\beta_g(\vec{r}, R, \vec{\Omega})] \quad (10)$$

e o operador integral de colisão como:

$$C_{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \frac{\Sigma_g^{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega})}{\Sigma_g^g(\vec{r})} \quad (11)$$

a Equação (9) toma a seguinte forma:

$$\chi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = S_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + C_{g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) T_g(\vec{r}' \rightarrow \vec{r}, \vec{\Omega}') \chi_{g'}(\vec{r}', \vec{\Omega}') \quad (12)$$

A Equação (12) é denominada "Equação Integral da Densidade de Partículas Emergentes", e a partir dela é feita a simulação do caminho aleatório percorrido pelos nêutrons num sistema. A solução desta equação pode ser dada por séries de Neumann:

$$\chi_g^n(\bar{r}, \bar{\Omega}) = \sum_{n=0}^{\infty} \chi_g^{n+1}(\bar{r}, \bar{\Omega}) \quad (13)$$

onde $\chi_g^n(\bar{r}, \bar{\Omega})d\bar{\Omega}$ é a densidade de partículas emergentes da n-ésima colisão com coordenadas no espaço de fase (grupo g, \bar{r} , $d\bar{\Omega}$ sobre $\bar{\Omega}$) e

$$\chi_g^0(\bar{r}, \bar{\Omega}) = S_g(\bar{r}, \bar{\Omega})$$

$$\chi_g^n(\bar{r}, \bar{\Omega}) = C_{g \rightarrow g}(\bar{r}, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) T_g(\bar{r}' \rightarrow \bar{r}, \bar{\Omega}') \chi_g^{n-1}(\bar{r}', \bar{\Omega}')$$

O fator efetivo de multiplicação de um sistema na i-ésima geração é calculado da seguinte maneira:

$$K_{EF}^{(1)} = \frac{\sum_{g=1}^G \int \int \int \frac{\chi_g}{4\pi v} \sum_{g'=1}^G \int \nu \Sigma_f^{g'}(\bar{r}) \phi_{g'}^{(1)}(\bar{r}, \bar{\Omega}') d\bar{\Omega}' d\bar{r} d\bar{\Omega}}{\sum_{g=1}^G \int \int \int \frac{\chi_g}{4\pi v} \sum_{g'=1}^G \int \nu \Sigma_f^{g'}(\bar{r}) \phi_{g'}^{(1-1)}(\bar{r}, \bar{\Omega}') d\bar{\Omega}' d\bar{r} d\bar{\Omega}} \quad (14)$$

A Equação de Transporte (1) é escrita para o domínio (\bar{r} , $\bar{\Omega}$, g) onde faz-se um balanço da população de nêutrons no espaço de fase. Basicamente, as perguntas feitas são quantos nêutrons entram ou saem do espaço de fase via migração, absorção, fissão ou espalhamento. O Método de Monte Carlo tem o ponto de vista do nêutron, e consiste basicamente em seguir o seu percurso de colisão em colisão no domínio (\bar{r} , $\bar{\Omega}$, g). Neste método, o problema de transporte de nêutrons é resolvido por meio das equações (12) e (13). Neste caso, $T_g(\bar{r}' \rightarrow \bar{r}, \bar{\Omega})$ e $C_{g \rightarrow g}(\bar{r}, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega})$ são determinados em cada colisão através de números aleatórios de forma a se obter $\chi_g(\bar{r}, \bar{\Omega})$.

Pretende-se nas seções seguintes mostrar como é efetuado o cálculo de K_{EF} para um sistema de acordo com o Método de Monte Carlo Análogo e com a Técnica dos Pesos Estatísticos.

3.1 - MÉTODO DE MONTE CARLO ANÁLOGO

O Método de Monte Carlo Análogo corresponde à seguinte sequência de eventos de acordo com a solução por séries de Neumann:

a) Nascimento da partícula, com suas coordenadas no espaço de fase $(\xi_0, \bar{r}_0, \bar{\Omega}_0)$ selecionadas de acordo com $S_g(\bar{r}, \bar{\Omega})$:

b) Transporte da partícula até o primeiro local de colisão de acordo com $T_g(\bar{r}' \rightarrow \bar{r}, \bar{\Omega}')$, com ela percorrendo uma distância dada por:

$$|\bar{r} - \bar{r}'| = - \frac{\ln \xi_1}{\Sigma_t(E')} \quad (15)$$

onde $T_g(\bar{r}' \rightarrow \bar{r}, \bar{\Omega}') = \xi_1$, um número aleatório entre 0 e 1. Note que $T_g(\bar{r}' \rightarrow \bar{r}, \bar{\Omega}')$ é a probabilidade de não colisão da partícula entre \bar{r}' e \bar{r} na direção $\bar{\Omega}'$.

c) Neste ponto é verificado se a partícula escapou do sistema de interesse, o que causa o término da história. Caso contrário, ela terá uma colisão e pode sofrer espalhamento, fissão ou captura radioativa, o que será decidido por um número aleatório ξ_2 de acordo com as respectivas funções densidades de probabilidade. Deste modo, haverá espalhamento se

$$0 < \xi_2 \leq \frac{\Sigma_s(E')}{\Sigma_s(E') + \Sigma_f(E') + \Sigma_a(E')} \quad (16)$$

haverá fissão se

$$\frac{\Sigma_s(E')}{\Sigma_s(E') + \Sigma_f(E') + \Sigma_a(E')} < \xi_2 \leq \frac{\Sigma_s(E') + \Sigma_f(E')}{\Sigma_s(E') + \Sigma_f(E') + \Sigma_a(E')} \quad (17)$$

e haverá captura radioativa se

$$\frac{\Sigma_s(E') + \Sigma_f(E')}{\Sigma_s(E') + \Sigma_f(E') + \Sigma_c(E')} < \xi_2 \leq 1 \quad (18)$$

No caso de espalhamento, a partícula emerge com novas coordenadas no espaço de fase (direção e energia) selecionadas de acordo com $C_{s, \vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}}$ através de outros números aleatórios. No caso de captura a história termina. No caso de fissão, um novo número aleatório ξ_3 é utilizado, e o número de nêutrons liberados é calculado de acordo com:

$$\nu = \text{parte inteira } [\bar{\nu}(E) + \xi_3] \quad (19)$$

e a história termina.

A posição em que ocorreu a fissão e o número de nêutrons liberados são armazenados a fim de serem utilizados na próxima geração;

d) Repetição dos passos a), b) e c) até que todas as partículas da fonte sejam processadas;

e) Começo de uma nova geração através da repetição dos passos a) até d) até que todas as partículas da fonte sejam processadas. As coordenadas no espaço de fase dos nêutrons da nova geração $(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ são determinadas a partir dos pontos de fissão da geração anterior.

A Figura 2 apresenta um diagrama simplificado do Método de Monte Carlo Análogo utilizado para cálculo do fator efetivo de multiplicação. Neste caso, K_{EF} de uma dada geração é determinado como sendo a razão entre o número total de nêutrons liberados e o número de nêutrons iniciais.

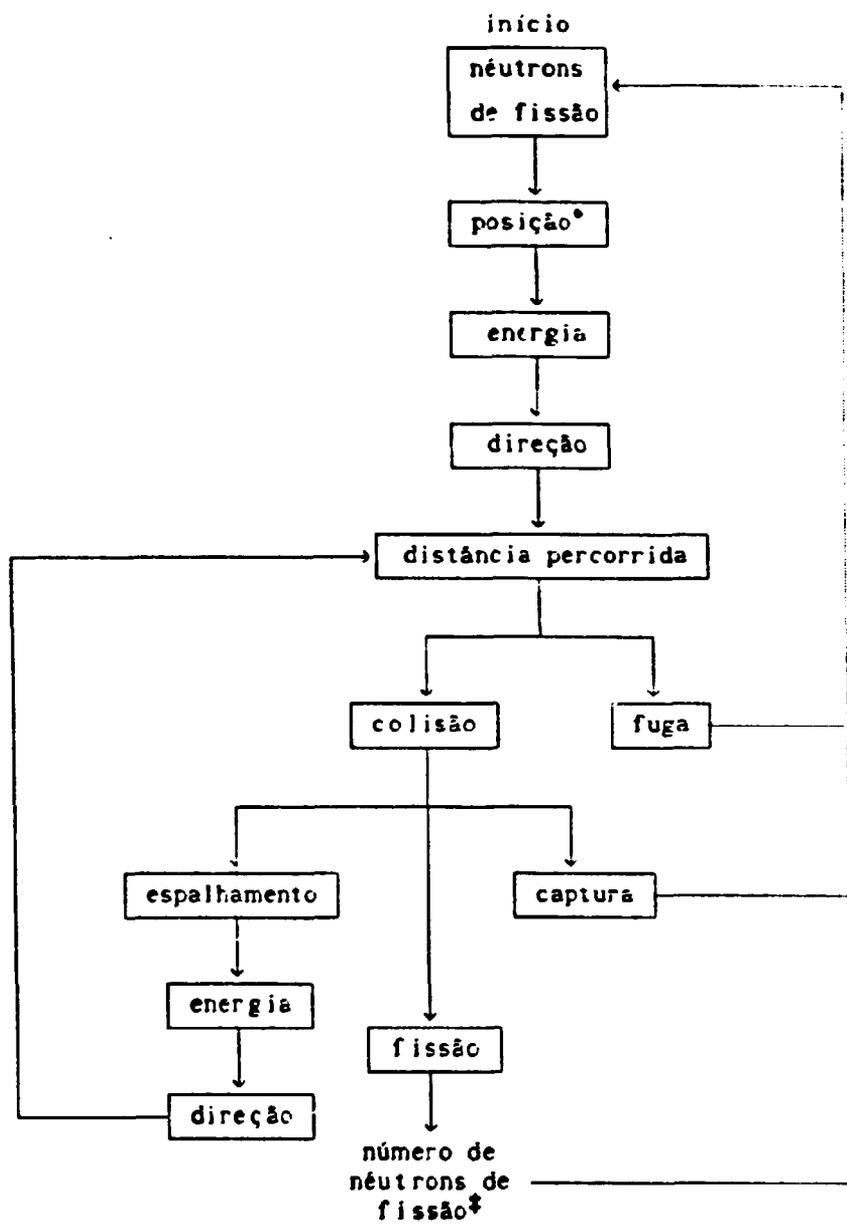


Figura 2: Diagrama simplificado para o cálculo de K_{eff} pelo Método de Monte Carlo Análogo.

*posições para a N-ésima geração baseadas nos pontos de fissão da geração N-1
 ‡ armazena número e posição das fissões para serem utilizados na geração N+1

3.2 - TÉCNICA DOS PESOS ESTATÍSTICOS

A fim de reduzir a alta variância devido a eventos bruscos como a absorção, por exemplo, desenvolveu-se a Técnica dos Pesos Estatísticos. Nesta técnica, a partícula nasce com peso WT igual a 1,0, e em cada colisão ela sobrevive com um peso dado por:

$$(WT)' = (WT) \cdot \frac{\Sigma_s(E)}{\Sigma_t(E)} \quad (20)$$

com a parcela restante tendo sido absorvida. Além disso, lhe é atribuído um peso de fissão, dado por:

$$FISW = (WT) \cdot \frac{\nu \Sigma_f(E)}{\Sigma_t(E)} \quad (21)$$

onde ν é o número médio de nêutrons liberados por fissão. Deste modo, FISW' representa a fração de nêutrons liberados nesta colisão.

O traçado da partícula no sistema através da técnica dos pesos estatísticos consiste basicamente em definir três pesos para cada região e grupo de energia: WTAVG (o peso médio da região); WTLOW (o peso inferior); e WTHIGH (o peso superior). A roleta russa é o procedimento pelo qual um nêutron com peso WT menor que WTLOW é eliminado do sistema ou tem o seu peso aumentado para WTAVG, já que não é vantajoso seguir nêutrons com peso muito baixo. A probabilidade de sobrevivência numa roleta russa é dada por $p = WT/WTAVG$. Ele sobrevive e tem o seu peso aumentado se um número aleatório ξ é tal que $\xi \leq p$. Caso contrário, seu peso é igualado a zero e a sua história termina. Assim, o peso esperado dos nêutrons após várias roletas russas é igual à probabilidade de sobrevivência multiplicado pelo novo peso somado com a probabilidade de eliminação multiplicada pelo peso respectivo, ou seja:

$$\left(\frac{WT}{WTAVG} \right) \cdot WTAVG + \left(1 - \frac{WT}{WTAVG} \right) \cdot 0 = WT$$

Como o peso após várias roletas russas é o mesmo, WT, temos que este procedimento não influencia o resultado obtido.

Em sistemas com várias regiões e grandes variações nos pesos médios, a variância no fator efetivo de multiplicação pode ser muito grande. Para reduzi-la, um nêutron com peso maior que WTHIGH sofre fracionamento, ou seja, se divide em dois, com cada parte ficando com a metade do peso original. Neste caso, um dos nêutrons é seguido enquanto que o outro fica guardado e só será seguido quando já houver terminado a história do primeiro.

Numa região muito importante os valores dos pesos devem ser baixos para que a roleta russa ocorra raramente e o fracionamento mais frequentemente. O inverso deve ocorrer numa região pouco importante. Em geral, atribui-se baixos pesos para a região físsil e valores altos para o moderador e refletor. Os pesos são normalmente escolhidos como inversamente proporcionais ao fluxo adjunto numa dada região e energia. Assim, como o fluxo adjunto nos dá uma noção da importância de uma dada região, ele será maior no combustível e em regiões do refletor mais próximas da região físsil (e, portanto, teremos pesos mais baixos) e menor conforme nos afastamos da região físsil (fornecendo pesos maiores).

O fator efetivo de multiplicação do sistema, K_{eff} , é obtido por meio de médias de várias gerações. O fator efetivo de multiplicação da i -ésima geração (K_i) é o número de nêutrons produzidos nesta geração dividido pelo número de nêutrons no início da mesma (N), ou seja [20].

$$K_i = \frac{\sum_{j=1}^N \sum_{col} FISW}{N} = \frac{\sum_{j=1}^N \sum_{col} (WT) \cdot \frac{\nu \Sigma_f(E)}{\Sigma_t(E)}}{N} \quad (22)$$

Esta equação é similar à equação (14), pois o somatório sobre todos os nêutrons e sobre todas as colisões de cada nêutron é equivalente às integrais nas variáveis do

espaço de fase. O somatório e as integrais cobrem todos os nêutrons no domínio em consideração. Cada fissão produz ν nêutrons, e a probabilidade de um nêutron sofrer fissão é $\Sigma_f(E)/\Sigma_t(E)$. O peso WT presente na expressão (22) indica apenas a fração de nêutrons em consideração, pois na técnica de pesos estatísticos força-se o nêutron a sobreviver diminuindo-lhe o peso. Tal somatório é, portanto, o número total de nêutrons liberados nesta geração.

Como K_i é a soma de um grande número de eventos randômicos diferentes, o Teorema do Limite Central diz que os números K_i , $i=1, \dots, M$ irão seguir a distribuição normal (M é o número de gerações de nêutrons). O valor médio dos K_i 's é o K_{EF} do sistema, e é dado por:

$$K_{EF} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M K_i \quad (23)$$

sendo que o desvio padrão da média é dado por:

$$\sigma = \left[\frac{1}{M} \left(\frac{1}{M-1} \sum_{i=1}^M (K_i - K_{EF})^2 \right) \right]^{1/2} \quad (24)$$

Assim, o resultado final deve ser expresso como:

$$K = K_{EF} \pm \sigma \quad (25)$$

Se M é grande ($M \geq 50$), então aproximadamente 68% dos K_i 's estão entre $K_{EF} - \sigma$ e $K_{EF} + \sigma$, 95% estão entre $K_{EF} - 2\sigma$ e $K_{EF} + 2\sigma$, e 99% estão entre $K_{EF} - 3\sigma$ e $K_{EF} + 3\sigma$. Vale salientar que, quando se utiliza o Método de Monte Carlo, um sistema é considerado subcrítico quando $K_{EF} - 2\sigma \leq 0,95$ [1,3].

CÓDIGOS COMPUTACIONAIS PARA A ANÁLISE DE CRITICALIDADE

Vários códigos computacionais foram desenvolvidos especificamente para cálculos de criticalidade nuclear, como os códigos da série KENO e MONK. Alguns códigos que não possuem esta finalidade específica também são bastante úteis em análises de criticalidade. Nesta categoria enquadram-se o GAMTEC-II [31] e o HAMMER-TECHNION [32] para cálculo celular, o CITATION [11] para cálculos de geometrias semi-infinitas e o MCNP para cálculos de geometrias extremamente complexas. Os principais códigos utilizados neste trabalho foram o KENO-IV e o MCNP, que serão vistos com mais detalhes a seguir. Será dada também uma breve descrição de outros códigos da série KENO na Seção 4.1.1. Maiores informações a respeito de outros códigos utilizados neste trabalho podem ser encontradas nos respectivos manuais.

4.1 - O CÓDIGO KENO-IV

O KENO-IV [22] simula a solução da Equação de Transporte de Nêutrons estática com dependência energética em três dimensões através da técnica dos pesos estatísticos do Método de Monte Carlo. Ele tem sido exaustivamente comparado com dados experimentais [33,34,35] e é disponível nas instalações do IPEN-CNEN/SP e COPESP, sendo largamente utilizado em cálculos de criticalidade (determinação de K_{eff} , fugas, absorções, fluxos e densidades de fissões). Dentre as diversas opções nele disponíveis destacam-se as seguintes:

- **Distribuição Espacial dos Nêutrons na Primeira Geração:** A distribuição inicial da fonte de fissão pode ser tipo plana, tipo cosseno, ou escolhida de forma arbitrária. Em geral utiliza-se a intuição para se fazer uma boa escolha. Assim, por exemplo, para uma esfera não refletida, uma distribuição tipo cosseno é bastante razoável, enquanto que

para uma esfera refletida uma distribuição plana é mais adequada. Após poucas gerações a fonte de fissão se aproxima da verdadeira fonte. As primeiras três gerações são suficientes para alcançar tal equilíbrio em problemas com geometrias simples. Em cálculos com geometrias mais complexas podem ser necessários dados das dez ou mais gerações iniciais, sendo que estes dados não são utilizados nas estimativas dos parâmetros desejados;

- **Seções de Choque:** O KENO-IV dispõe da biblioteca de seções de choque Hansen-Roach [36] em 16 grupos de energia e permite a utilização de bibliotecas externas. Pode também ser utilizada a biblioteca gerada a partir do GAMTEC-II e introduzida no KENO-IV em 15 grupos de energia. Outro conjunto de seções de choque que pode ser utilizado é derivado do acoplamento entre os sistemas NJOY [37] e AMPX-II [38] desenvolvido no IPEN-CNEN/SP. Os sistemas acoplados NJOY e AMPX-II processam dados a partir das bibliotecas básicas de dados nucleares ENDF/B-IV [39] e JENDL-3 [40]. Pode-se também utilizar seções de choque em 4 grupos de energia geradas a partir de um cálculo celular do código HAMMER-TECHNION. Um dos objetivos deste trabalho é verificar a classe de problemas em que cada conjunto é mais apropriado;

- **Condições de Contorno:** Se o nêutron sai do sistema ele pode fugir (condição de contorno de vácuo) ou colidir num refletor. Pode-se seguir a trajetória do nêutron no refletor do modo como é feito na região físsil ou usar uma das técnicas disponíveis no código.

Na opção denominada **reflexão automática**, os pesos estatísticos são proporcionais ao inverso do fluxo adjunto para uma dada posição e uma dada energia. Os pesos adjacentes às fontes de fissão são definidos como 0,5, o mesmo valor do peso médio na região físsil. Os pesos para esta opção encontram-se numa biblioteca a parte e são disponíveis para a água, concreto, parafina e grafite.

Na opção denominada **reflexão especular**, todos os nêutrons que colidem nos contornos retornam ao sistema como se tivessem sido refletidos por um espelho, o que é

equivalent a simular um sistema infinito. A energia é inalterada, e existe a opção de alterar ou não o seu peso. É possível considerar as propriedades absorvedoras de um refletor por uma simples redução no peso do nêutron.

Na opção denominada albedo diferencial [41], o nêutron que colide com um contorno retorna ao sistema com valores de peso, energia e direção selecionados randomicamente de apropriadas distribuições, poupando tempo computacional ao evitar o traçado real dos nêutrons no refletor. Este método produz bons resultados para sistemas grandes e resultados conservativos para sistemas pequenos [42], e pode reduzir bastante o tempo de computação em alguns casos;

- **Geometria:** O KENO-IV possui duas opções de geometria. A primeira trata de geometrias simples e é denominada "nested regions". A outra opção é utilizada em geometrias complicadas e denomina-se geometria generalizada. Na Seção 4.3 são descritas estas opções disponíveis no KENO-IV;

- **Pesquisa de Criticalidade:** O KENO-IV permite que se faça pesquisas de criticalidade quanto à dimensão, ao número de unidades ou quanto ao espaçamento entre elas num sistema. Nas pesquisas de dimensão, as superfícies podem variar independentemente de acordo com a opção do usuário e as dimensões do refletor variam automaticamente a fim de manter suas espessuras.

4.1.1 - OUTROS CÓDIGOS DA SÉRIE KENO

Os códigos da família KENO para cálculos de criticalidade através do Método de Monte Carlo em multigrupos são eficientes, simples e adequados para a análise de situações comumente encontradas na estocagem e transporte de materiais físséis. Eles vêm passando por contínuos melhoramentos a fim de diminuir as incertezas das versões anteriores. Estas incertezas são decorrentes das aproximações feitas na simulação do problema, aos métodos utilizados para processar seções de choque e às suposições,

limitações e aproximações feitas no código propriamente dito. A seguir é apresentada uma breve discussão sobre os mais importantes códigos desta série baseada em informações obtidas a partir da referência [43]. Serão considerados apenas aqueles que foram desenvolvidos após o KENO-IV.

a) KENO-IV/CG [23]: Este código é idêntico ao KENO-IV, tendo como única diferença o fato de usar o pacote de geometria combinatorial. Através deste pacote é possível descrever configurações tridimensionais considerando uniões, intersecções e subtrações de figuras como esferas, paralelepípedos, cones, etc. Os operadores lógicos (+,or,-) são usados a fim de descrever formas geométricas complexas de maneira razoavelmente simples e com grande eficiência.

b) KENO-V [24]: Publicado no módulo SCALE em 1982, esta versão combina muitas das capacidades do KENO-IV com algumas melhorias, dentre as quais destacam-se:

- Entrada de dados mais flexível, possuindo blocos de entrada, palavras chaves e valores "default";

- Possibilita a especificação da origem de cilindros, semicilindros, esferas e semiesferas, permitindo a utilização de cilindros e esferas não concêntricos;

- Capacidade de supergrupamento das informações dependentes da energia, tais como seções de choque e fluxos. Este aspecto automático é ativado quando o espaço de memória de computador é insuficiente para tratar o problema inteiro. Os dados são divididos em supergrupos, escritos em um dispositivo de acesso direto e movidos na memória conforme o necessário. Assim, grandes problemas podem rodar em pequenos computadores;

- Espalhamento P_i nas seções de choque ao invés de P_1 utilizado nas versões anteriores;

- A opção albedo diferencial foi estendida a fim de incluir outras estruturas de grupos de energia (e não mais apenas a estrutura de 16 grupos da Hansen-Roach).

c) KENO-Va [25]: Foi publicado em 1984, e é uma extensão melhorada do KENO-V. Ele possui todos os aspectos do KENO-V com avanços referentes à descrição geométrica de um sistema, entre as quais destacam-se as opções de "arranjo de arranjo" e de "buracos". A primeira permite a construção de arranjos de outros arranjos, o que só é limitado por restrições de espaço de memória. A opção de "buraco" permite colocar uma unidade ou um arranjo em algum lugar desejado dentro de uma região de interesse. Esta unidade não pode intersectar nenhuma região geométrica e deve ser completamente contida dentro de uma região. Esta característica permite ao usuário modelar precisamente uma grande variedade de problemas de segurança quanto à criticalidade. Permite também fazer cortes superficiais nas figuras em qualquer ponto entre a origem e a superfície externa.

d) KENO-VI: Esta última versão ainda não foi publicada, e pretende ser uma versão vetorizada da série KENO. Exceto em relação à geometria, o KENO-VI utiliza os mesmos dados de entrada na forma de blocos que o KENO-V. O pacote geométrico permite formas como cone, cubóide, cilindro, dodecaedro, cilindro elíptico, elipsóide, paralelepípedo, plano, esfera e cunha, entre outros. O código gera a superfície quadrática para representar a forma especificada. O pacote também permite intersecções de superfícies, além de translações e/ou rotações entre elas.

4.2 - O CÓDIGO MCNP

O código MCNP [28] simula a resolução da equação de transporte com dependências temporal e energética em geometria tridimensional para nêutrons e fótons utilizando o Método de Monte Carlo. Ele dispõe de dados de seções de choque contínuos com a energia ou discretos numa estrutura de 262 grupos, tratamento $S(\alpha, \beta)$ para termalização, várias técnicas de redução de variância e capacidade de realizar estudos de criticalidade nas mais diversas formas geométricas. Estes e outros aspectos fazem deste código um dos mais completos na descrição dos diversos fenômenos envolvidos no transporte de nêutrons e fótons através da matéria.

A seguir serão tratados brevemente alguns aspectos importantes deste código referentes ao transporte de nêutrons através da matéria:

- **Fenômenos Físicos Simulados pelo MCNP:** Por utilizar o Método de Monte Carlo, o processo de perseguição dos nêutrons é semelhante ao descrito no Capítulo 3. A diferença em relação ao KENO-IV é que o MCNP oferece ao usuário a opção de utilizar o método análogo ou o método estatístico. Além disso, o MCNP realiza um tratamento bastante sofisticado para espalhamento inelástico, considerando reações tais como (n,n') , $(n,2n)$, $(n,n'\alpha)$, (n,γ) , etc. Neste caso, a direção de cada partícula emitida é amostrada a partir de uma tabela de distribuições angulares e sua energia é, independentemente, amostrada de uma lei de espalhamento;

- **Geometria:** O pacote geométrico disponível no MCNP é bastante simples e sofisticado, sendo isto um dos aspectos mais importantes para a popularização deste código. A Seção 4.3 fornece uma descrição detalhada deste aspecto, bem como uma comparação com o pacote geométrico do KENO-IV;

- **Seções de Choque:** Neste código existem 5 classes de dados nucleares: bibliotecas de seções de choque contínuas com a energia, bibliotecas de seções de choque discretas, biblioteca de transporte de fótons, seções de choque de dosimetria de nêutrons e biblioteca para tratamento $S(\alpha,\beta)$. A biblioteca de seções de choque contínuas constitui-se em outro importante aspecto deste código, já que neste caso evita-se erros devido ao processamento utilizado para gerar seções de choque em grupos de energia. São disponíveis as bibliotecas contínuas do ENDF/B-IV [39] processadas a 300 K e do ENDF/B-IV [44] processadas a 0 K.

As bibliotecas discretas disponíveis no código estão em 262 grupos de energia e são geradas a partir de uma ponderação nas seções de choque individuais de algumas bibliotecas contínuas. Neste caso, a energia e distribuições angulares da partícula emitida são idênticas àquelas do conjunto original a partir da qual o conjunto discreto é gerado.

O tratamento térmico feito pelo MCNP para nêutrons com energia inferior a 10 eV é baseado no modelo de espalhamento por gás livre. Baseia-se também no fato de que, nas energias térmicas, a seção de choque de espalhamento elástico à temperatura zero é aproximadamente independente da energia e as seções de choque das demais reações são aproximadamente independentes da temperatura. O tratamento térmico $S(\alpha, \beta)$ consiste numa representação mais refinada do espalhamento de nêutrons térmicos por moléculas e sólidos cristalinos. O intervalo de energia dos nêutrons para se usar este tratamento é de 10^{-5} até 4 eV, e é disponível para o hidrogênio na água e no polietileno, para o berílio, para a grafite, etc. A avaliação do conjunto mais adequado de dados nucleares para uma dada classe de problema é outro objetivo deste trabalho;

- **Técnicas de Redução de Variância:** O MCNP dispõe de várias técnicas de redução de variância, que reduzem o tempo de computação requerido para obter resultados de uma determinada precisão, sendo que a escolha da melhor técnica a ser utilizada depende do problema em questão. Dentre as opções fornecidas pelo código destacam-se a técnica da importância da célula (IMP), a técnica do "weight window" e as técnicas de corte por energia ou tempo.

a) **Técnica da Importância da Célula:** Neste caso, cada célula do problema deve ter uma determinada importância (entrada através do cartão IMP). Assim, quando uma partícula de peso WGT passa de uma célula de importância I para outra de importância I', podem ocorrer os seguintes processos:

- Se $I < I'$ e a razão I'/I é um inteiro n, ela sofre fracionamento e produz n partículas de peso WGT/n ;

- Se $I < I'$ mas I'/I não é inteiro, o fracionamento é feito probabilisticamente, de tal modo que o número de partículas emergentes seja igual a n ou n+1 com peso $WGT \cdot I'/I$, onde $n = \text{INT}(I'/I)$;

- Se $I > I'$, é jogada a roleta russa, de tal modo que a partícula "morre" com probabilidade $(I-I'/I)$ ou "sobrevive" com probabilidade I'/I e peso $WGT \cdot I'/I$.

b) **Técnica do "Weight Window":** O "weight window" é uma técnica de fracionamento e roleta russa dependente da posição e da energia. Para cada célula e cada energia de nêutron, o usuário fornece um peso limite inferior W_L e duas constantes, C_S e C_U . Se

uma partícula esta numa região do espaço e energia tal que seu peso WGT é menor que W_L , ela joga roleta russa com probabilidade de vitória igual a WGT/W_S , onde $W_S = C_S \cdot W_L$. Neste caso, seu novo peso é W_S . Se o peso da partícula é maior que W_U , onde $W_U = C_U \cdot W_L$, ela sofre fracionamento de tal modo que as partículas tenham seu peso diminuído pela metade. Isto ocorre até que todas as partículas geradas caiam dentro da janela de pesos. Nenhuma ação é tomada para $W_L < WGT < W_U$.

A entrada de dados para esta técnica é bastante complicada. Devem ser fornecidos, além dos valores de W_L , C_S e C_U , os intervalos de energia para os quais a técnica deve ser aplicada. Os valores de W_L podem ser fornecidos pelo usuário ou gerados pelo código na estrutura de grupos desejada.

c) Corte por Energia: No MCNP uma história pode terminar quando a energia da partícula cai abaixo de um limite especificado pelo usuário. Deve-se, porém, tomar cuidado com esta opção, dado que partículas com baixas energias são muito importantes em sistemas térmicos. Uma outra opção consiste no usuário fornecer um limite superior de energia após o qual as partículas são aniquiladas e um limite inferior abaixo do qual ocorre captura análoga ao invés do método estatístico (entrada através do cartão PHYS:N).

d) Corte por Tempo: O usuário pode fornecer um limite máximo de tempo para uma história, sendo que, após este, ela termina. É equivalente a um jogo de roleta russa com probabilidade de sobrevivência nula.

4.2.1 - CÁLCULO DE CRITICALIDADE COM O MCNP

O cálculo do fator efetivo de multiplicação de um sistema com o MCNP consiste em estimar o número médio de nêutrons de fissão produzidos em um ciclo por nêutron de fissão inicial. Uma história consiste na trajetória de um nêutron desde o seu nascimento via fissão até a morte via captura, escape ou fissão. Processos tais como $(n,2n)$ e $(n,3n)$ são considerados internos a uma história e não a terminam. O efeito dos

nêutrons atrasados é incluído usando $\bar{\nu}$ total, onde $\bar{\nu}$ é o número médio de nêutrons emitidos por fissão.

Para realizar um cálculo de criticalidade, o usuário deve fornecer a fonte para cálculos de criticalidade denominada KCODE, contendo o número de ciclos a serem efetuados, o número de histórias por ciclo, uma estimativa inicial para K_{EF} e o número de ciclos iniciais a serem desconsiderados. Associado a ela pode haver um cartão KSRC, que fornece as coordenadas iniciais da fonte de nêutrons. Com o decorrer dos ciclos, o MCNP calcula e usa a nova distribuição de fissão a partir dos ciclos anteriores. Estes dados são guardados, após cada ciclo, num arquivo denominado SRCTP, e podem ser utilizados em um cálculo posterior em que há um sistema semelhante envolvido. Neste caso, o cartão KSRC deve ser omitido.

O valor do autovalor K_{EF} é estimado para cada ciclo e ponderado sob e todos os ciclos ativos anteriores. O autovalor é estimado de três modos diferentes: estimador de colisão, estimador de absorção e estimador de comprimento da trilha. O MCNP também calcula a média simples e combinada entre eles, bem como todos os desvios padrões a partir do número de ciclos a serem desconsiderados. O valor que possui o menor desvio padrão é escolhido para representar o K_{EF} do sistema. Deve-se verificar se os estimadores são muito diferentes entre si ou se variam muito entre um ciclo e outro, pois isto não deve ocorrer quando a fonte já está devidamente em equilíbrio.

O MCNP tem sido pouco utilizado para cálculos de criticalidade [45,46,47], e os resultados encontrados nem sempre se mostraram satisfatórios. Entretanto, há o interesse em avaliar o programa neste tipo de análise devido a sua grande versatilidade e capacidade para tratar problemas com geometrias complexas.

Os sistemas encontrados no ciclo do combustível nuclear geralmente apresentam geometrias irregulares, cuja representação através de um código computacional deve ser a mais precisa possível para se efetuar um cálculo de criticalidade confiável. Deste modo, é apresentada a seguir uma descrição detalhada dos pacotes geométricos dos códigos KENO-IV e MCNP. Pretende-se com isto mostrar as capacidades e limitações de cada código para a simulação de sistemas com geometria complexa.

O KENO-IV possui duas opções de geometria. A primeira, chamada de "nested regions" corresponde a figuras simples, e inclui esferas, semiesferas, cilindros, semicilindros, cubos e paralelepípedos. Estas figuras são montadas, umas dentro das outras, a fim de formar uma estrutura que é chamada de "Box Type". Durante a montagem deve-se tomar o cuidado de evitar intersecções entre as figuras, sendo permitida apenas a intersecção de faces ou superfícies tangentes. Os vários "Box Type" montados podem ser convenientemente agrupados (opção "mixed box") a fim de formar o arranjo desejado. Esta opção permite arranjos retangulares de unidades diferentes em células de diferentes tamanhos. A única restrição no arranjo de células é que as faces adjacentes devem ser do mesmo tamanho. Se houver reflexão externa, é necessário especificar onde termina a região físsil e começa o refletor através de um comando apropriado para esta finalidade.

Para geometrias mais complexas existe o pacote de geometria generalizada, que foi desenvolvido para o código OSR [27], e no qual as regiões são descritas como volumes envolvidos por superfícies quadráticas (isto é, por equações da forma $Ax^2 + By^2 + Cz^2 + Dxy + Exz + Fyz + Gx + Hy + Iz + J = 0$). Isto permite manusear formas arbitrárias, dado que as superfícies podem sempre ser representadas ou aproximadas por equações quadráticas. Como desvantagens deste pacote encontram-se o excessivo tempo de computação, a entrada de dados complexa e sujeita a erros e o grande espaço de memória de computador requerido para simular um problema. Comparando as duas opções disponíveis no KENO-IV para uma esfera, o tempo de computação é 3 vezes maior e o número de comandos de entrada é 10 vezes maior com o uso da opção de geometria generalizada [3].

O MCNP possui a capacidade de simular as mais complexas formas geométricas, de modo mais simples e mais poderoso que a opção de geometria generalizada do KENO-IV. Para tal, ele inclui um conjunto de equações de superfícies de 1° ao 4° graus: planos, esferas, cilindros, cones, elipsóides, hiperbolóides, parabolóides e toros circulares ou elípticos. Estas superfícies são especificadas por termos mnemônicos e por parâmetros obtidos do próprio sistema a ser modelado. A Tabela 4 fornece os tipos de superfície, os mneumônicos e a ordem dos cartões de entrada.

Uma célula é definida pelas intersecções, uniões ou complementos das regiões do espaço que estas superfícies delimitam. Nos dados de entrada do código estas operações são representadas por operadores Booleanos: $\&$ → intersecção; $:$ → união; $\#$ → complemento; $()$ → ordem dos dados (opcional). Em cada célula é definida a densidade do material que a constitui e parâmetros opcionais para técnicas de redução de variância.

Com estas colocações, nota-se claramente a superioridade do pacote geométrico do MCNP em relação ao pacote tradicionalmente utilizado no KENO-IV ("nested regions"). Comparando com o pacote de geometria generalizada, o pacote disponível no MCNP apresenta várias facilidades para especificação de células e superfícies que não existem no KENO-IV e que simplificam bastante a simulação de sistemas com geometrias altamente irregulares. Por outro lado, para sistemas com geometrias mais simples é preferível utilizar o KENO-IV, já que neste caso o sistema pode ser precisamente simulado de modo bastante simples, o que nem sempre é possível com o MCNP. O Apêndice A mostra um exemplo da simulação de um sistema simples com os dois códigos que ilustra bem esta afirmação.

Tabela 4 : Cartões de superfície para o MCNP.

Mnemonic	Type	Description	Equation	Card Entries
P PX PY PZ	Plane ↓	General Normal to X-axis Normal to Y-axis Normal to Z-axis	$Ax+By+Cz-D=0$ $x-D=0$ $y-D=0$ $z-D=0$	A B C D D D D
S0 "1 S2 S3 S4	Sphere ↓	Centered at Origin General Centered on X-axis Centered on Y-axis Centered on Z-axis	$x^2+y^2+z^2-R^2=0$ $(x-R)^2+(y-f)^2+(z-z)^2-R^2=0$ $(x-R)^2+y^2+z^2-R^2=0$ $x^2+(y-f)^2+z^2-R^2=0$ $x^2+y^2+(z-R)^2-R^2=0$	R R Y Z R R R Y R R R
C/X C/Y C/Z CX CY CZ	Cylinder ↓	Parallel to X-axis Parallel to Y-axis Parallel to Z-axis On X-axis On Y-axis On Z-axis	$(y-f)^2+(z-z)^2-R^2=0$ $(x-R)^2+(z-z)^2-R^2=0$ $(x-R)^2+(y-f)^2-R^2=0$ $y^2+z^2-R^2=0$ $x^2+z^2-R^2=0$ $x^2+y^2-R^2=0$	Y Z R R Z R R Y R R R R
K/X K/Y K/Z KX KY KZ	Cone ↓	Parallel to X-axis Parallel to Y-axis Parallel to Z-axis On X-axis On Y-axis On Z-axis	$\sqrt{(y-f)^2+(z-z)^2}-1(x-R)=0$ $\sqrt{(x-R)^2+(z-z)^2}-1(y-f)=0$ $\sqrt{(x-R)^2+(y-f)^2}-1(z-z)=0$ $\sqrt{y^2+z^2}-1(x-R)=0$ $\sqrt{x^2+z^2}-1(y-f)=0$ $\sqrt{x^2+y^2}-1(z-z)=0$	R Y Z 1 ² ± 1 R Y Z 1 ² ± 1 R Y Z 1 ² ± 1 R 1 ² ± 1 Y 1 ² ± 1 R 1 ² ± 1 !! used only for 1 sheet cone
SQ	Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axes parallel to X-, Y-, or Z-axis	$A(x-R)^2+B(y-f)^2+C(z-z)^2$ $+2D(x-R)+2E(y-f)$ $+2F(z-z)+G=0$	A B C D E F G H I J
GQ	Cylinder Cone Ellipsoid Hyperboloid Paraboloid	Axes not parallel to X-, Y-, or Z- axis	$Ax^2+By^2+Cz^2+Dxy+Eyz$ $+fz+Gx+Hy+Jz+K=0$	A B C D E F G H J K
TX TY TZ	Elliptical or circular tor- us. Axis is parallel to X, Y or Z-axis		$(x-R)^2/B^2+(\sqrt{(y-f)^2+(z-z)^2}-A)^2/C^2-1=0$ $(y-f)^2/B^2+(\sqrt{(x-R)^2+(z-z)^2}-A)^2/C^2-1=0$ $(z-z)^2/B^2+(\sqrt{(x-R)^2+(y-f)^2}-A)^2/C^2-1=0$	R Y Z A B C R Y Z A B C R Y Z A B C
X Y Z P	Surfaces defined by points			

AVALIAÇÃO DOS PROGRAMAS PARA A ANÁLISE DE DIVERSOS SISTEMAS

Pretende-se a seguir verificar, entre os códigos aqui considerados (KENO-IV e MCNP), qual o mais apropriado para a análise de criticalidade dos diversos sistemas encontrados no ciclo do combustível nuclear. Serão considerados sistemas rápidos, epitérmicos e térmicos. No decorrer da análise também serão consideradas as várias opções disponíveis nos dois códigos, a fim de obter uma metodologia computacional para cálculos de criticalidade nuclear. Esta metodologia deverá considerar o maior número de informações a respeito de cada um dos parâmetros que podem ou devem ser utilizados na entrada de dados dos códigos em questão.

5.1 - TRATAMENTO DE REFLETORES

Numa primeira fase deste trabalho procurou-se verificar qual a melhor maneira de tratar problemas com refletores que possam ser considerados infinitos no sentido neutrônico. Para tal considerou-se o sistema crítico da Figura 3, que é constituído por uma esfera de aço inox refletida por água e preenchida por uma solução aquosa homogênea de $P_{U(4,66)}(NO_3)_4 + U(0,66)O_2(NO_3)_2$. A Tabela 5 mostra as concentrações críticas dos núclídeos da solução fornecidas na referência [48].

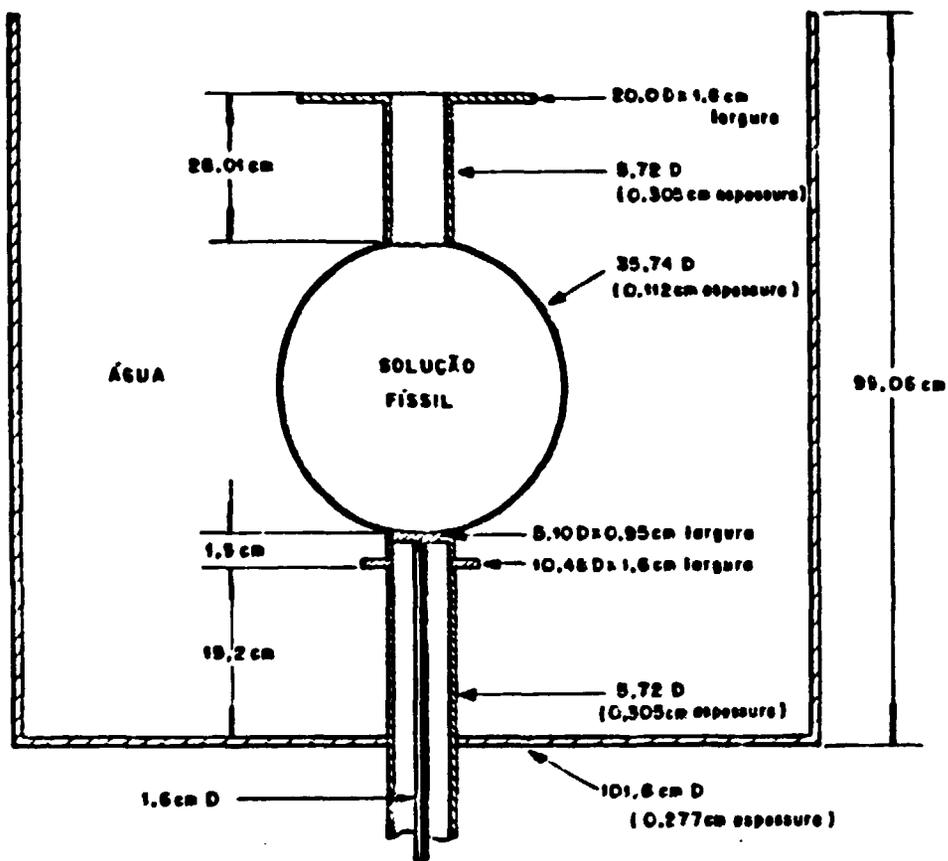


Figura 3: Esfera de aço preenchida por uma solução aquosa homogênea de $\text{Pu}(4,66)(\text{NO}_3)_4 + \text{U}(0,66)\text{O}_2(\text{NO}_3)_2$ e refletida com água [48].

Tabela 5: Concentrações críticas dos núclídeos que aparecem na solução aquosa homogênea de $\text{Pu}(4,66)(\text{NO}_3)_4 + \text{U}(0,66)\text{O}_2(\text{NO}_3)_2$ (Figura 3 - ref.48).

Nuclídeo	Concentração Átomos/(barn.cm)
Pu-238	$2,5316 \cdot 10^{-8}$
Pu-239	$1,7000 \cdot 10^{-4}$
Pu-240	$8,2845 \cdot 10^{-6}$
Pu-241	$4,0000 \cdot 10^{-7}$
Pu-242	$2,4897 \cdot 10^{-8}$
U-235	$2,6628 \cdot 10^{-6}$
U-236	$2,5530 \cdot 10^{-8}$
U-238	$3,9496 \cdot 10^{-4}$
N	$3,5418 \cdot 10^{-3}$
O	$3,8544 \cdot 10^{-2}$
H	$5,6278 \cdot 10^{-2}$
Gd	$2,1909 \cdot 10^{-7}$
Fe	$8,6327 \cdot 10^{-6}$

Neste primeiro caso usou-se apenas o código KENO-IV com as bibliotecas Hansen-Roach (HR) ou geradas a partir do GAMTEC-II (GII). A simulação da Figura 3 foi feita com 3 "box types", e considerou todas as estruturas envolvidas. Apenas no uso da opção de reflexão automática não foi possível fazer este tipo de simulação, sendo que neste caso apenas a esfera físsil foi representada. A Tabela 6 mostra alguns resultados obtidos para este sistema no computador IBM 4381.

Tabela 6: Comparação entre algumas opções de reflexão do KENO-IV para o sistema mostrado na Figura 3.

OPÇÃO DE CÁLCULO	TEMPO DE CPU (min)	$K_{\text{Ef}} \pm \sigma$
cálculo normal (HR)	19,080	$0,9940 \pm 0,0043$
cálculo normal (GII)	13,192	$1,0306 \pm 0,0045$
reflexão automática (HR)	10,427	$0,9997 \pm 0,0049$
albedo diferencial (HR)	6,535	$0,9990 \pm 0,0064$

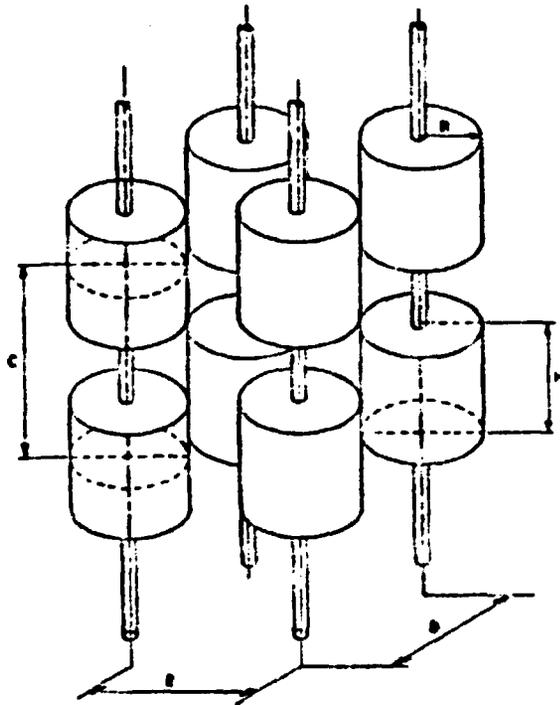
HR: Hansen Roach ; GII: Gamtec-II

Analisando esta tabela pode-se perceber que em todos os casos em que se utilizou a biblioteca Hansen-Roach os resultados foram bons ($< 1\%$ de desvio em relação ao valor crítico), e que o tempo de CPU foi bastante variado, sendo três vezes menor na opção albedo diferencial e duas vezes menor na opção de reflexão automática em relação à opção de reflexão normal.

Assim, a opção albedo diferencial deve ser utilizada sempre que possível no programa KENO-IV. Esta opção tem a restrição de só possuir dados para alguns materiais refletores e tratar apenas de problemas com reflexão infinita em termos neutrônicos. Aconselha-se não utilizar a biblioteca gerada a partir do GAMTEC-II para sistemas que contenham plutônio, já que os resultados obtidos através deste procedimento apresentaram grandes desvios nesta e em outras simulações não apresentadas neste trabalho.

5.2 - COMPARAÇÃO COM SISTEMAS RÁPIDOS E EPITÉRMICOS

A fim de simular sistemas rápidos e epitérmicos com o KENO-IV e o MCNP, considerou-se um arranjo $2 \times 2 \times 2$ de cilindros de urânio metálico (com 93,2 wt% de enriquecimento) refletido ou não por uma camada de parafina (Figura 4). Eles possuem 5,748 cm de raio, 10,765 cm de altura e 20,962 kg de urânio. Sua densidade é de $18,76 \text{ g/cm}^3$, e a densidade da parafina é de $0,88 \text{ g/cm}^3$ para 1,3 cm de refletor e de $0,93 \text{ g/cm}^3$ para as demais espessuras. Na Tabela 7 são fornecidas as concentrações atômicas dos núclídeos em questão obtidas a partir de dados retirados da referência [49]. Nestes casos a espessura de refletor varia de zero até um valor finito.



A → espessura de parafina ao
redor dos cilindros

Figura 4: Arranjo 2x2x2 não refletido de cilindros de urânio metálico com enriquecimento de 93,2 wt% refletidos ou não com parafina [49].

Tabela 7: Concentrações atômicas dos núclídeos envolvidos no arranjo 2x2x2 de cilindros de urânio metálico (Figura 4 - ref.49).

Nuclídeo	Concentração Átomos/(barn.cm)
U-235	$4,47964 \cdot 10^{-2}$
U-238	$2,65763 \cdot 10^{-3}$
U-234	$4,82709 \cdot 10^{-4}$
U-236	$9,57218 \cdot 10^{-5}$
• C	$3,75638 \cdot 10^{-2}$
H	$7,81327 \cdot 10^{-2}$
•• C	$3,96981 \cdot 10^{-2}$
H	$8,25721 \cdot 10^{-2}$

• densidade da parafina = $0,88 \text{ g/cm}^3$

•• densidade da parafina = $0,93 \text{ g/cm}^3$

A análise foi feita considerando os seguintes aspectos:

- Código utilizado: KENO-IV ou MCNP.

- Bibliotecas de seções de choque: A fim de comparação, no KENO-IV foi utilizado o conjunto de dados provenientes da biblioteca Hansen-Roach em 16 grupos de energia ou o conjunto em 15 grupos de energia gerado a partir do GAMTEC-II. As seções de choque selecionadas para o MCNP são derivadas do ENDF/B-IV para o U-235, o U-238 e o Hidrogênio; do ENDL 85 para o U-234 e o U-236; e do LASL para o Carbono. A princípio procurou-se utilizar seções de choque contínuas para todos os núclídeos, a fim de evitar os erros computacionais baseados nos processos de ponderação em grupos de energia. Em alguns casos usou-se também o tratamento térmico $S(\alpha, \beta)$.

- Técnicas de redução de variância / cond. de contorno: As técnicas utilizadas no refletor foram a reflexão automática no KENO-IV e as técnicas de importância da célula, corte por energia e "weight window" no MCNP. A opção albedo diferencial do KENO-IV não foi utilizada porque nenhum dos sistemas possui uma espessura de parafina que possa ser considerada infinita em termos neutrônicos. Os limites e pesos para a técnica do "weight window" foram tomados como sendo iguais àqueles utilizados na opção de reflexão automática do KENO-IV. Na técnica de corte por energia, partículas com energia acima de 20,0 MeV são aniquiladas e abaixo de 0,025 eV são tratadas como análogas.

- Em todos os casos executados com o KENO-IV foram consideradas 30.000 histórias de nêutrons e fonte inicial plana. O MCNP simulou 10.000 histórias nos três primeiros casos e 20.000 histórias nos outros dois. Tais valores foram selecionados por satisfazerem os critérios de convergência da fonte.

As Tabelas 8 e 9 apresentam os mais importantes resultados obtidos. Nelas, os índices A, B e C significam que o arranjo é crítico se refletido por A cm. de parafina e possuir um espaçamento central entre as unidades de B cm na direção horizontal e de C cm na direção vertical (vide Figura 4). Os computadores utilizados foram o IBM-4381 e o CDC-CYBER 180/830.

Nos três casos mostrados na Tabela 8 o refletor tem pequena espessura, e, portanto, não foi subdividido para efeito de simulação. Assim, todos os casos simulados com o MCNP usaram a técnica da importância da célula, com importância igual a 1,0 nos cilindros, na região entre eles e no refletor, e igual a 0,0 na parte externa do sistema. A simulação com o KENO-IV não utilizou nenhuma técnica de redução de variância.

Na Tabela 9, todos os casos executados com o MCNP utilizaram a técnica de corte por energia. Além disso, todos os casos executados com a biblioteca Hanson-Roach foram feitos no CDC. Nestes casos, que reproduzem experimentos que possuem uma camada maior de refletor, este foi subdividido de acordo com sua espessura. Isto permitiu utilizar a opção de reflexão automática do KENO-IV. Para o MCNP foi em alguns casos utilizada a técnica da importância da célula, sendo dada importância igual a 3,0 nos cilindros e na região entre eles, 2,0 na primeira camada de refletor, 1,0 na camada externa e 0,0 na parte externa do sistema.

Em todos os casos das Tabelas 8 e 9, quando é indicado "CONT+DISC" significa que foram utilizadas seções de choque contínuas nos cilindros e discretas no refletor. O cálculo do mesmo problema em dois computadores diferentes foi necessário devido ao fato do GAMTEC-II estar instalado somente no IBM-4381 e o MCNP somente no CDC-CYBER 180/830. Desse modo, a comparação entre os resultados não pode ser feita diretamente, necessitando que alguns casos idênticos fossem executados nas duas máquinas.

Tabela 8: Comparação entre os resultados fornecidos pelos códigos para o sistema mostrado na Figura 4 com pequena reflexão externa (sistema rápido).

A (cm) B (cm) C (cm)	CÓDIGO	BIBLIOTECAS DE SEÇÕES DE CHOQUE	TEMPO DE CPU (min)	$k_{EF} \pm \sigma$
A = 0,0 B = 13,74 C = 15,01	KENO-IV	GAMTEC-II	0,78	1,0654 ± 0,0349
		HANSEN-ROACH - IBM	0,62	0,9983 ± 0,0342
HANSEN-ROACH - CDC		2,31	1,0654 ± 0,0346	
	MCNP	CONTINUAS	10,76	0,9999 ± 0,0080
A = 1,30 B = 15,17 C = 14,44	KENO-IV	GAMTEC-II	1,14	1,0511 ± 0,0344
		HANSEN-ROACH - IBM	0,93	0,9973 ± 0,0347
HANSEN-ROACH - CDC		3,35	1,0005 ± 0,0347	
	MCNP	CONT+DISC DISCRETAS	13,96 9,69	1,0035 ± 0,0065 1,0138 ± 0,0101
A = 3,8 B = 19,70 C = 18,97	KENO-IV	GAMTEC-II	3,78	1,0374 ± 0,0042
		HANSEN-ROACH - IBM	3,95	0,9975 ± 0,0044
HANSEN-ROACH - CDC		14,36	0,9950 ± 0,0052	
	MCNP	CONT+DISC	31,37	1,0024 ± 0,0087

Tabela 9: Comparação entre os resultados fornecidos pelos códigos para o sistema mostrado na Figura 4 com grande reflexão externa (sistema epitérmico).

A (cm) B (cm) C (cm)	CÓDIGO	BIBLIOTECAS DE SEÇÕES DE CHOQUE	TÉCNICAS DE REDUÇÃO DE VARIÂNCIA	TEMPO DE CPU (min.)	$K_{EF} \pm \sigma$
A = 7,60 B = 23,01 C = 22,27	KENO-IV	GAMTEC-II	—	11,31	1,0352 ± 0,0047
		HANSEN-ROACH	—	54,73	0,9994 ± 0,0048
		HANSEN-ROACH	REF. AUTOMÁTICA	22,77	0,9977 ± 0,0054
	MCNP	CONT + DISC	IMP	85,66	1,0113 ± 0,0076
		DISC + S(α, β)	IMP	96,34	1,0073 ± 0,0056
		DISC + S(α, β)	WEIGHT WINDOW	93,08	1,0089 ± 0,0056
A = 15,20 B = 23,48 C = 22,75	KENO-IV	GAMTEC-II	—	18,34	1,0274 ± 0,0043
		HANSEN-ROACH	—	95,61	0,9990 ± 0,0049
		HANSEN-ROACH	REF. AUTOMÁTICA	23,06	0,9950 ± 0,0053
	MCNP	DISC - S(α, β)	WEIGHT WINDOW	95,11	0,9922 ± 0,0071

Analisando as Tabelas 8 e 9 pode-se tirar as seguintes conclusões referentes ao cálculo de criticalidade de sistemas rápidos e epitérmicos:

a) O KENO-IV, quando utilizado com a biblioteca Hansen-Roach, fornece resultados com desvio inferior a 1% em relação ao valor crítico. Por outro lado, quando é utilizada a biblioteca gerada a partir do GAMTEC-II, o KENO-IV produz resultados com um desvio que varia de 2,7% a 6,5% em K_{eff} . Os desvios obtidos diminuem conforme a espessura do refletor aumenta, ou seja, conforme o sistema começa a se comportar como epitérmico. Assim, a biblioteca gerada com o programa GAMTEC-II é indicada apenas para sistemas térmicos. Os resultados obtidos com o MCNP estão bem próximos do valor crítico, desde que sejam utilizadas as técnicas propostas;

b) A opção de reflexão automática para espessura finita de refletor na simulação com o KENO-IV mostrou ser vantajosa em todos os casos, pois manteve os resultados dentro do desvio esperado e diminuiu o tempo de CPU;

c) O tempo de CPU é bem maior no MCNP em relação ao mesmo caso com o KENO-IV. Esta diferença diminui quando a espessura do refletor aumenta, se utilizadas no MCNP as técnicas de redução de variância apropriadas. Quando o KENO-IV é executado com a opção de reflexão automática, o tempo de CPU volta a apresentar as diferenças iniciais;

Durante o desenvolvimento deste trabalho foram utilizadas várias técnicas visando otimizar os resultados obtidos com o MCNP. Com base nos conhecimentos adquiridos, sugere-se as seguintes recomendações para cálculos de criticalidade com este código:

a) Para sistemas sem ou com pequena espessura de refletor (sistemas rápidos) aconselha-se o uso de seções de choque contínuas, pois, conforme pode ser observado na Tabela 8, o uso de seções de choque discretas para todos os núclídeos acarretou um desvio de aproximadamente 1,4%. Se houver hidrogênio, este deve ser tratado com seções de choque discretas, e os demais núclídeos da região onde ele se encontra podem ser tratados com seções de choque contínuas ou discretas. Não foi possível simular nenhum dos problemas deste trabalho utilizando seções de choque contínuas para o hidrogênio pois o programa não convergia;

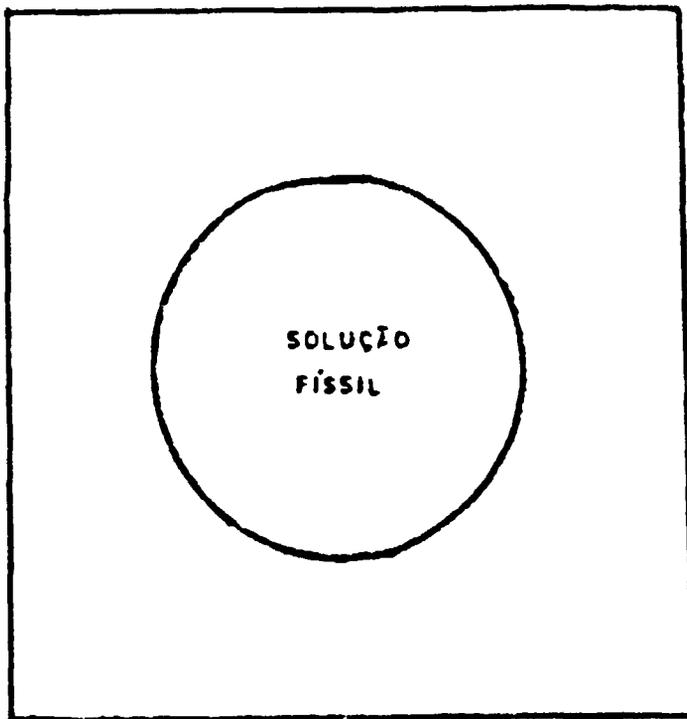
b) O tratamento S(a,B) mostrou ser importante em sistemas epitérmicos, sendo que na ausência dele os resultados se mostraram um pouco conservativos, conforme pode ser observado na Tabela 9. Além disso, nestes sistemas já é possível utilizar seções de choque discretas sem alterar os resultados obtidos;

c) A técnica do "weight window" é mais consistente que a técnica da importância das células (IMP), já que nesta as importâncias dadas às diversas regiões obedecem a um critério subjetivo. Ainda assim, os resultados obtidos com as duas técnicas estão em bom acordo.

O Apêndice A fornece a listagem dos dados de entrada requeridos para que o KENO-IV e o MCNP realizem um cálculo de criticalidade considerando os dois últimos casos mencionados na Tabela 9.

5.3 - COMPARAÇÃO COM SISTEMAS TÉRMICOS

Neste caso foram considerados cinco sistemas térmicos constituídos de esferas de alumínio preenchidas por uma solução de nitrato de urânio dissolvido em água [$UO_2(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$] e não refletidas, isto é, imersas no vácuo (Figura 5). A Tabela 10 mostra as densidades nucleares dos nuclídeos envolvidos fornecidas nas referências [50,51]. Estas referências também fornecem os valores experimentais encontrados para o fator efetivo de multiplicação de cada sistema considerado. Nesta análise foram utilizados os experimentos denominados ORNL 1, 2, 3, 4 e 10, nos quais o urânio é enriquecido em 93,18 wt%. Todos os experimentos são esferas de 34,595 cm de raio, com exceção do ORNL 10, que possui 61,011 cm de raio. As soluções dos experimentos ORNL 2, 3 e 4 são envenenadas por boro e as demais não são. Desse modo, os valores experimentais são obtidos variando-se o raio da esfera ou as concentrações atômicas envolvidas.



Raio: $R = 61,011 \text{ cm}$ (ORNL-10)

$R = 34,595 \text{ cm}$ (demais)

C.C. Vácuo do lado externo da esfera

Figura 5: Esfera de alumínio preenchida por solução de nitrato de uranila dissolvido em água [50,51].

Tabela 10: Concentrações atômicas (Átomos/barrn.cm) dos nuclídeos que aparecem nas soluções aquosas de nitrato de uranila (Figura 5 - refs. 50 e 51).

Nuclídeo	ORNL-1	ORNL-2	ORNL-3	ORNL-4	ORNL-10
U-234	$5,360.10^{-7}$	$6,310.10^{-7}$	$7,160.10^{-7}$	$7,620.10^{-7}$	$4,090.10^{-7}$
U-235	$4,807.10^{-6}$	$5,621.10^{-6}$	$6,394.10^{-6}$	$6,796.10^{-6}$	$3,618.10^{-6}$
U-236	$1,380.10^{-7}$	$1,630.10^{-7}$	$1,840.10^{-7}$	$1,970.10^{-7}$	$2,200.10^{-7}$
U-238	$2,807.10^{-6}$	$3,281.10^{-6}$	$3,734.10^{-6}$	$3,967.10^{-6}$	$1,985.10^{-6}$
B-10	0,0	$1,029.10^{-6}$	$2,057.10^{-6}$	$2,532.10^{-6}$	0,0
H	$6,623.10^{-2}$	$6,615.10^{-2}$	$6,607.10^{-2}$	$6,603.10^{-2}$	$6,639.10^{-2}$
O	$3,374.10^{-2}$	$3,380.10^{-2}$	$3,386.10^{-2}$	$3,390.10^{-2}$	$3,359.10^{-2}$
N	$1,869.10^{-4}$	$2,129.10^{-4}$	$2,392.10^{-4}$	$2,548.10^{-4}$	$1,116.10^{-4}$

Na análise de criticalidade com os códigos KENO-IV e MCNP foram considerados os seguintes aspectos:

a) Código utilizado: KENO-IV ou MCNP.

b) Bibliotecas de seções de choque: Provenientes do GAMTEC-II ou da biblioteca Hansen-Roach para o KENO-IV. Para o MCNP foram utilizadas as bibliotecas discretas em 262 grupos derivadas a partir do ENDF/B-IV para o Hidrogênio, o Nitrogênio, o Oxigênio e o U-235; do ENDF-76 para o U-234 e o U-238; e do ENDF-73 para o U-236. Utilizou-se também o tratamento térmico S(α, β) para o hidrogênio na solução a 300 K.

c) Técnicas de redução de variância: Em todos os casos executados com o MCNP foram utilizadas as técnicas da importância da célula (com IMP igual a 1,0 dentro da esfera e igual a 0,0 fora dela), e de corte por energia (com os mesmos limites dos sistemas considerados anteriormente). No KENO-IV não foi utilizada nenhuma condição de contorno.

d) Na simulação com o KENO-IV considerou-se 30.000 histórias de nêutrons, enquanto que com o MCNP considerou-se 20.000 histórias em todos os casos a fim de satisfazer os critérios de convergência da fonte.

As Tabelas 11 e 12 apresentam os mais importantes resultados computacionais obtidos e o valor experimental para cada sistema considerado. Na Tabela 12 os resultados apresentados para o KENO-IV com a biblioteca HANSEN-ROACH foram obtidos no CDC-CYBER 180/830, e a comparação entre os tempos de CPU foi omitida por seguir a mesma tendência observada na Tabela 11.

Tabela II: Comparação entre os resultados para sistemas térmicos (Figura 5).

EXPERIMENTO	CÓDIGO	BIBLIOTECAS DE SEÇÕES DE CHOQUE	TEMPO DE CPU (min)	$K_{EF} \pm \sigma$	RESULTADO EXPERIMENTAL
ORNL 1	KENO-IV	GAMTEC-II	9,8	$1,0092 \pm 0,0038$	1,00026
		HANSEN-ROACH - IPM	13,1	$1,0045 \pm 0,0031$	
		HANSEN-ROACH - CDC	52,9	$1,0057 \pm 0,0037$	
	MCNP	DISC DISC + S(α, β)	127,6 115,4	$0,9807 \pm 0,0057$ $0,9774 \pm 0,0065$	
ORNL 2	KENO-IV	GAMTEC-II	8,5	$1,0059 \pm 0,0034$	0,99975
		HANSEN-ROACH - IBM	11,5	$1,0071 \pm 0,0037$	
		HANSEN-ROACH - CDC	46,3	$1,0098 \pm 0,0033$	
	MCNP	DISC DISC + S(α, β)	111,0 102,3	$0,9774 \pm 0,0060$ $1,0047 \pm 0,0063$	

Tabela 12: Comparação entre os fatores de multiplicação para sistemas térmicos (Figura 5).

EXPERIMENTO	CÓDIGO	BIBLIOTECAS DE SEÇÕES DE CHOQUE	$K_{EF} \pm \sigma$	RESULTADO EXPERIMENTAL
ORNL 3	KENO-IV	GAMTEC-II	$0,9996 \pm 0,0031$	0,99994
		HANSEN-ROACH	$1,0071 \pm 0,0031$	
	MCNP	DISC + S(α, β)	$0,9993 \pm 0,0049$	
ORNL 4	KENO-IV	GAMTEC-II	$1,0015 \pm 0,0035$	0,99924
		HANSEN-ROACH	$1,0090 \pm 0,0031$	
	MCNP	DISC + S(α, β)	$1,0012 \pm 0,0080$	
ORNL 10	KENO-IV	GAMTEC-II	$0,9992 \pm 0,0021$	1,00031
		HANSEN-ROACH	$1,0194 \pm 0,0029$	
	MCNP	DISC + S(α, β)	$0,9971 \pm 0,0034$	

Analisando as Tabelas 11 e 12 pode-se tirar as seguintes conclusões referentes ao cálculo de criticalidade de sistemas térmicos:

a) O KENO-IV, quando executado com a biblioteca gerada a partir do GAMTEC-II, fornece resultados com desvio inferior a 1% em relação ao valor experimental em todos os casos. Quando se utilizou a biblioteca Hansen-Roach, o KENO-IV forneceu um valor 1,9% conservativo no experimento ORNL 10, onde o raio é o dobro dos demais. Os resultados obtidos com o MCNP também apresentam desvio inferior a 1% em relação ao valor experimental;

b) O tempo de CPU é mais que duas vezes maior quando se usa o MCNP. Quando se utilizou o KENO-IV, o tempo de CPU é menor com o GAMTEC-II em relação ao mesmo caso executado com a biblioteca Hansen-Roach;

c) O tratamento térmico $S(\alpha,\beta)$ é fundamental em sistemas térmicos, pois, conforme pode ser observado nos experimentos ORNL 1 e 2, na ausência deste os resultados foram subestimados em mais de 1% em relação ao valor experimental. Este fato já era esperado, dado que o tratamento $S(\alpha,\beta)$ implica num tratamento mais detalhado do espalhamento de nêutrons de baixa energia.

**GERAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE E INTERAÇÃO
ENTRE AS UNIDADES DE UM SISTEMA**

Neste capítulo pretende-se discutir alguns pontos importantes a serem considerados na análise de criticalidade de um sistema. Tais assuntos geralmente levam a algumas dúvidas, sendo de importância fundamental que eles sejam corretamente considerados para que a análise do sistema não seja prejudicada. Primeiramente será abordado o problema da geração de seções de choque em condições de moderação ótima. Ressalta-se o cuidado que se deve ter com a estimativa correta do termo de fuga ao se gerar as seções de choque com cálculos celulares. A segunda seção trata do problema da interação entre as unidades de um sistema e apresenta um procedimento de como estimar esta interação. Finalmente na terceira seção aborda-se o problema de como representar materiais como água, terra e concreto, que são comumente encontrados como interstícios de arranjos de depósitos de materiais fisséis, e garantir a segurança quanto à criticalidade nuclear.

6.1 - GERAÇÃO DE SEÇÕES DE CHOQUE COM MODERAÇÃO ÓTIMA

Foi colocado no Capítulo 2 que a determinação do máximo grau de moderação que um sistema possa suportar consiste em um meio efetivo de controle de criticalidade para arranjos ou unidades fisséis. Este princípio é amplamente utilizado em cálculos de criticalidade no IPEN-CNEN/SP e na COPESP. Em geral, considera-se uma célula unitária e determina-se sua moderação ótima através de programas de cálculo celular como o HAMMER-TECHNION. As concentrações atômicas assim encontradas são então utilizadas na análise do sistema completo.

No entanto, quando se considera sistemas de pequeno porte, alguns cuidados devem ser tomados na análise de criticidade, pois a inclusão ou não da fuga de nêutrons pode alterar completamente as conclusões. Para exemplificar, considere a célula unitária do elemento combustível padrão americano do reator IEA-RI:

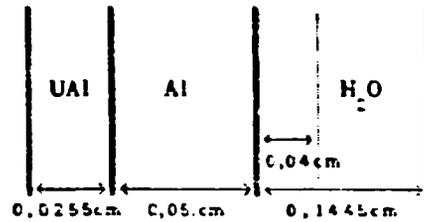


Figura 6: Célula unitária para o elemento combustível padrão americano do reator IEA-RI.

Para a obtenção da condição de moderação ótima é necessário incluir no cálculo celular uma estimativa da fuga de nêutrons. Nos programas de cálculo celular a fuga é incluída através do "buckling" geométrico (B^2). A Figura 6 mostra a camada de água que fornece moderação ótima, 0,04 cm, considerando o sistema infinito, ou seja, fuga zero. A Tabela 13 apresenta os resultados do fator efetivo de multiplicação para as duas situações de moderação, com a fuga estimada para o reator IEA-RI e com fuga nula.

Tabela 13: Resultados obtidos com o HAMMER-TECHNION para a determinação da moderação ótima com e sem fuga de nêutrons para a célula da Figura 6.

Fuga	B^2 (m^{-2})	Espessura (cm)	K_{eff}
Não	10^{-8}	0,1445	1,697072
Não	10^{-8}	0,040	1,789704
Sim	82	0,1445	1,060025
Sim	82	0,040	0,623589

A inclusão da fuga é importante pois altera completamente o resultado das análises. Para um sistema sem fuga o excesso de água funciona como absorvedor de nêutrons e consegue-se o maior K_{EF} com um espectro mais duro como mostra a Tabela 14. Ao se incluir a fuga de nêutrons, o espectro mais duro favorece a fuga de nêutrons contribuindo negativamente para a reatividade do sistema e a espessura ótima de moderador é maior. A Tabela 14 mostra que com a fuga a condição de máxima reatividade do sistema tem espectro mais térmico.

Tabela 14: Espectro de nêutrons obtido com cálculos celulares com o HAMMER-TECHNION para a célula da Figura 6.

Grupo	Sem Fuga $B^2=10^{-8} \text{ m}^{-2}$		Com Fuga $B^2=82 \text{ m}^{-2}$	
	Espessura 0,1445 cm	Espessura 0,04 cm	Espessura 0,1445 cm	Espessura 0,04 cm
1	0,255327	0,257148	0,248544	0,277130
2	0,272692	0,329752	0,262125	0,323310
3	0,287263	0,306821	0,234507	0,225486
4	0,264718	0,106260	0,255025	0,174078

Grupo 1: 10,0 Mev - 8,21 Kev
 Grupo 2: 8,21 Kev - 5,53 Kev
 Grupo 3: 5,53 Kev - 0,625 ev
 Grupo 4: 0,625 ev - 0

Os sistemas que são analisados visando a segurança quanto à criticalidade têm fuga bastante acentuada. É necessário que se contabilize esta fuga para a obtenção de parâmetros em condições de moderação ótima.

6.2 - CONSIDERAÇÕES SOBRE A INTERAÇÃO ENTRE AS UNIDADES DE UM SISTEMA

Uma questão que sempre surge na análise de criticalidade de um arranjo com várias unidades fisséis semelhantes é de que forma a interação entre elas altera o fator efetivo de multiplicação do sistema e em que circunstâncias pode-se realizar um cálculo computacional considerando apenas uma unidade com uma condição de contorno adequada.

Com o objetivo de discutir um pouco este assunto, considere a Figura 7, que mostra uma vista em corte de um dos cofres de estocagem do reator IEA-R1. A especificação completa do sistema, bem como a análise de criticalidade do arranjo, são mostradas no Capítulo 7. O componente da Figura 7 é um dos 50 componentes que fazem parte do arranjo da Figura 8. A especificação dos materiais é igual à descrita na Figura 11.

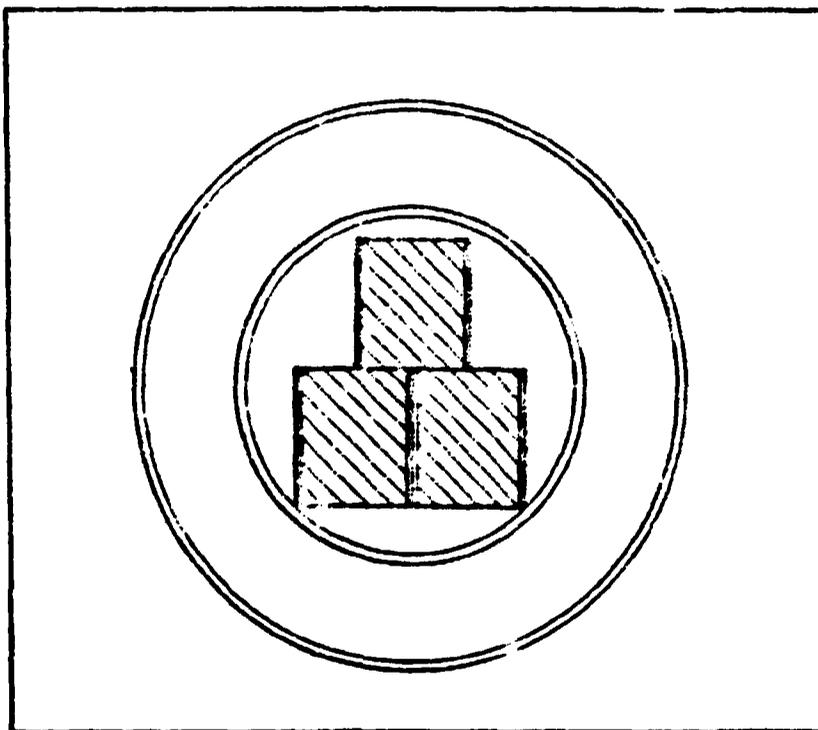


Figura 7: Vista em corte de um dos cofres de estocagem de combustível irradiado do IEA-R1 com raio de 10,5 cm.

Para realizar a análise de criticidade do arranjo completo, pode-se considerar várias situações de acordo com as hipóteses feitas sobre a interação entre as unidades do sistema completo. Destas várias hipóteses, considere três situações que constituem um envoltório das possíveis situações:

a) Apenas 1 componente é simulado com um código, e utiliza-se condição de fuga nula após a meia distância entre dois componentes consecutivos;

b) O sistema é simulado explicitamente, com todos os 50 componentes descritos detalhadamente;

c) Apenas 1 componente é simulado com um código, com condição de contorno de vácuo após a meia distância entre dois componentes consecutivos;

A situação a) é a mais conservativa, enquanto que a situação b) é a mais realista. A situação c) é considerada a fim de verificar se os componentes são independentes neutronicamente. Os resultados obtidos foram:

$$a) K_{EF} = 0,8369 \pm 0,0042$$

$$b) K_{EF} = 0,6821 \pm 0,0073$$

$$c) K_{EF} = 0,6805 \pm 0,0078$$

Neste caso, todos os resultados mostraram que o sistema é subcrítico. Assim, uma análise conservativa como a feita na situação a) pode ser usada como primeira estimativa para o cálculo do fator efetivo de multiplicação de um sistema. Se este resultado for inferior a 0,95 (dentro do desvio padrão abordado no Capítulo 3), pode-se afirmar que o sistema é subcrítico. Caso contrário, um cálculo mais detalhado deve ser feito a fim de confirmar ou não tal análise e evitar que um sistema ou procedimento sejam incorretamente julgados do ponto de vista da criticidade nuclear.

Observa-se também neste exemplo que os componentes são praticamente independentes, conforme mostram os resultados das situações b) e c). Entretanto, somente com o resultado da situação c) não seria possível tirar conclusões a respeito da

criticalidade do sistema. Seriam necessários alguns cálculos adicionais com 2, 3 ou mais unidades para se verificar o incremento em K_{EF} .

6.3 - SEÇÕES DE CHOQUE QUE REPRESENTAM CONCRETO, TERRA, AR e ÁGUA

Outra fonte de dúvidas que surge num cálculo de criticalidade refere-se à melhor maneira de tratar refletores quando existem dúvidas a respeito de sua real composição. Em muitas situações os interstícios entre as unidades são preenchidos por concreto, por terra ou por água. A composição precisa dos materiais ou da água é de difícil obtenção e depende de análises realizadas nos devidos locais. Para efeitos de análise de criticalidade, busca-se definir a composição do material na qual a reatividade do sistema seja maximizada.

Para a definição do conjunto de seções de choque apropriado a interstícios, considerou-se novamente a Figura 8, que mostra os cofres de estocagem de elementos combustíveis irradiados do reator IEA-R1, que possuem como interstício uma parte de concreto e outra de terra e água. Quatro possíveis composições de interstícios foram consideradas: Concreto Oak Ridge, Ar, Água e uma composição média de um solo com 10% de água [52]. O teste com ar foi incluído para verificar o impacto na interação das unidades do sistema. A Tabela 15 mostra uma composição típica de solo apresentada na referência [52].

Tabela 15: Composição média de um solo com 10% de água - Ref. [52].

Elemento	Wt%	Átomos/(barr.cm.)
Si	26,60	$5,70 \cdot 10^{-3}$
Al	7,84	$1,75 \cdot 10^{-3}$
Fe	4,83	$5,21 \cdot 10^{-4}$
H	1,11	$6,63 \cdot 10^{-3}$
Ca	3,47	$5,20 \cdot 10^{-4}$
K	2,51	$3,86 \cdot 10^{-4}$
O	53,60	$2,02 \cdot 10^{-2}$

A Tabela 16 mostra uma comparação entre os resultados obtidos em cada caso considerando a simulação explícita do arranjo conforme a Figura 6.

Tabela 16: Resultados obtidos de acordo com o interstício utilizado.

Interstício	$K_{EF} \pm \sigma$
Concreto Oak Ridge	$0,6821 \pm 0,0075$
Air	$0,6651 \pm 0,0092$
Terra	$0,6518 \pm 0,0114$
Água	$0,4668 \pm 0,0097$

Observando esta tabela pode se concluir que, entre os possíveis interstícios, o Concreto Oak Ridge é o que produz resultados de maior fator efetivo de multiplicação e que a Água é mais absorvedora que a Terra da referência S2. Em muitos casos em que a composição do interstício é desconhecida, sugere-se a realização de testes para verificar a situação de maior reatividade. Deve-se notar que a resposta depende de cada problema, pois o nível de interação entre as unidades afeta o resultado.

APLICAÇÃO DA METODOLOGIA PARA OS COFRES DE ESTOCAGEM
DE COMBUSTÍVEL IRRADIADO DO IEA-R1

Neste capítulo pretende-se mostrar uma aplicação da metodologia computacional proposta para a análise de criticalidade de um problema real. O sistema estudado consiste nos 50 cofres de estocagem de combustível irradiado do reator de pesquisas IEA-R1, que está localizado nas instalações do IPEN-CNEN/SP. Com os cálculos efetuados pretende-se verificar as capacidades e limitações dos códigos e procedimentos mencionados anteriormente, incluindo o valor obtido para o fator efetivo de multiplicação do sistema e as dificuldades encontradas na simulação geométrica do problema.

A motivação para a realização deste trabalho está no fato de IPEN possuir intenções de aumentar a potência de operação do reator IEA-R1 de 2 MW para 5 MW. Isto irá gerar um maior número de elementos combustíveis queimados para armazenagem nos cofres após um período de decaimento no fundo da piscina do reator. Desse modo, os cofres que atualmente possuem no máximo 1 elemento combustível (alguns ainda nem são utilizados) podem ser requisitados para estocar 3 ou até 9 elementos. A análise de criticalidade será realizada para a pior situação possível, ou seja, o inundamento dos cofres por infiltração de água do solo. Tal infiltração teria início ao redor dos cofres, levando a água para dentro destes devido a falha nos drenos existentes.

Esta análise já foi feita anteriormente [53], utilizando o código HAMMER-TECHNION para geração de seções de choque e o código KENO-IV para o cálculo do fator efetivo de multiplicação do sistema. Pretende-se aqui analisar este problema com o código MCNP. Esta análise foi estimulada pelo fato do cálculo anterior com o programa KENO-IV apresentar uma série de aproximações de ordem geométrica e as seções de choque fornecidas pelo programa HAMMER-TECHNION serem em 4 grupos de energia. Com o MCNP é

possível representar exatamente o problema, já que ele possui uma opção geométrica mais poderosa que o KENO-IV, além de permitir a utilização de bibliotecas de seções de choque contínuas com a energia. Após isto, será realizada uma análise comparativa utilizando o KENO-IV com as bibliotecas Hansen-Roach e com a biblioteca gerada a partir do GAMTEC-II.

7.1 - DESCRIÇÃO DO PROBLEMA:

Os 50 cofres de estocagem de combustível irradiado estão localizados no primeiro andar do reator IEA-RI. A Figura 8 mostra como os cofres estão arranjados e as distâncias reais entre eles. Observa-se por esta figura que existem cofres com raio de 8,0 cm (indicados por P) e cofres com raio de 10,5 cm (G). A profundidade dos cofres é tal que podem armazenar até 3 elementos combustíveis na sua seção axial. Na seção radial podem ser armazenados até 3 elementos nos cofres de 10,5 cm de raio, totalizando 9 elementos dentro do cofre. Os cofres de 8,0 cm de raio podem armazenar apenas 1 elemento na seção radial, totalizando 3 elementos dentro do cofre.

O elemento combustível considerado é o elemento padrão de procedência americana, descrito detalhadamente na referência [54]. Ele é constituído por 18 placas com enriquecimento de 93,15 wt% na liga de UAl e revestido por Al-1100. As dimensões da parte ativa do elemento são 7,61 cm x 7,98 cm x 62,5 cm, sendo que as placas laterais de alumínio possuem 0,476 cm de espessura. A Figura 9 mostra a seção radial de um elemento, e a Figura 10 mostra a seção axial de uma das placas.

As camadas de aço inox (tipo 304) encontradas nos cofres possuem 0,4 cm de espessura, e a camada de chumbo 8,20 cm de espessura. Os cofres possuem 315 cm de profundidade, e são inseridos num bloco de concreto de 130 cm de profundidade. A partir de então os cofres são envolvidos por terra.

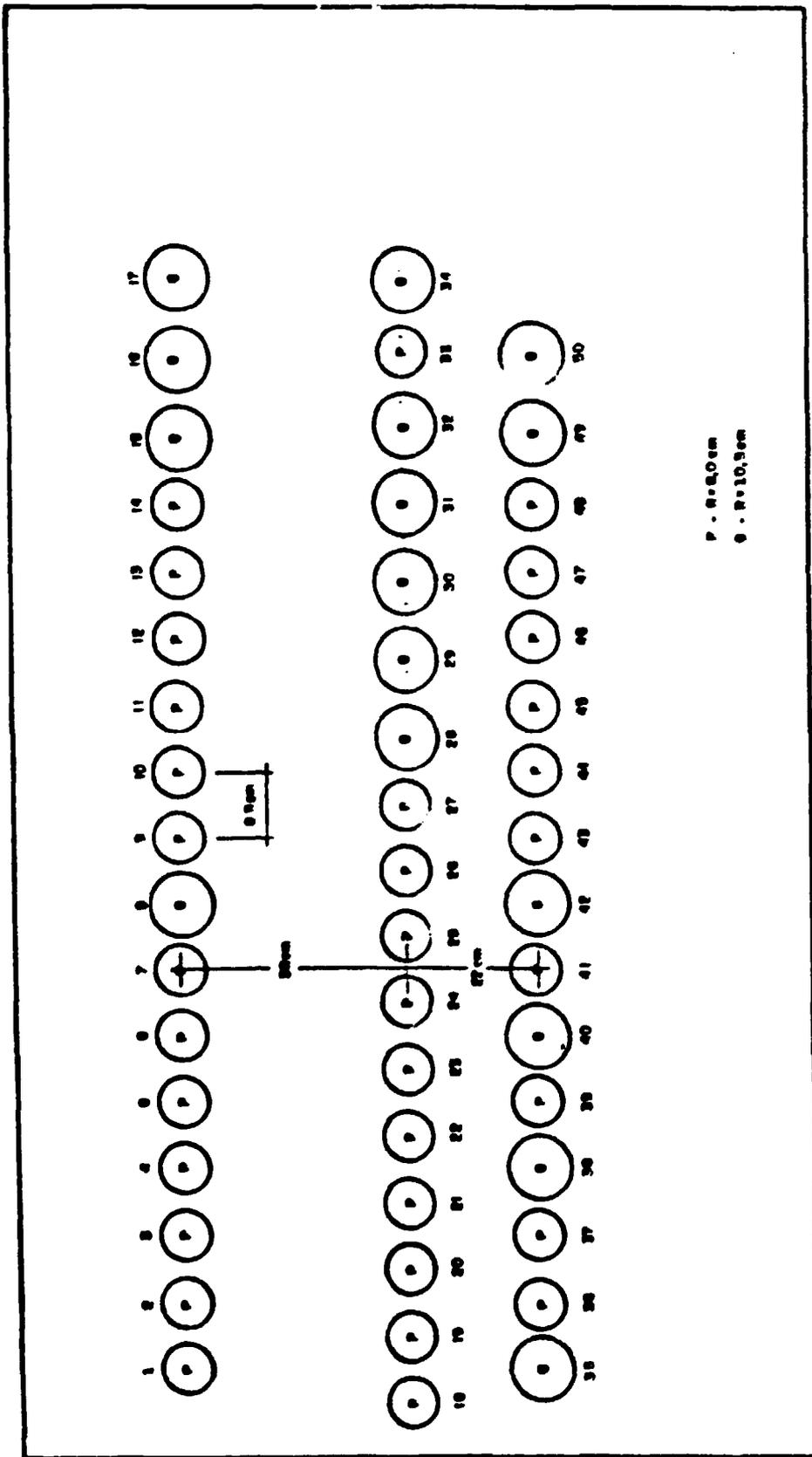


Figura 8: Arranjo esquemático dos 50 cofres de estocagem de combustível irradiado do

IEA-R1.

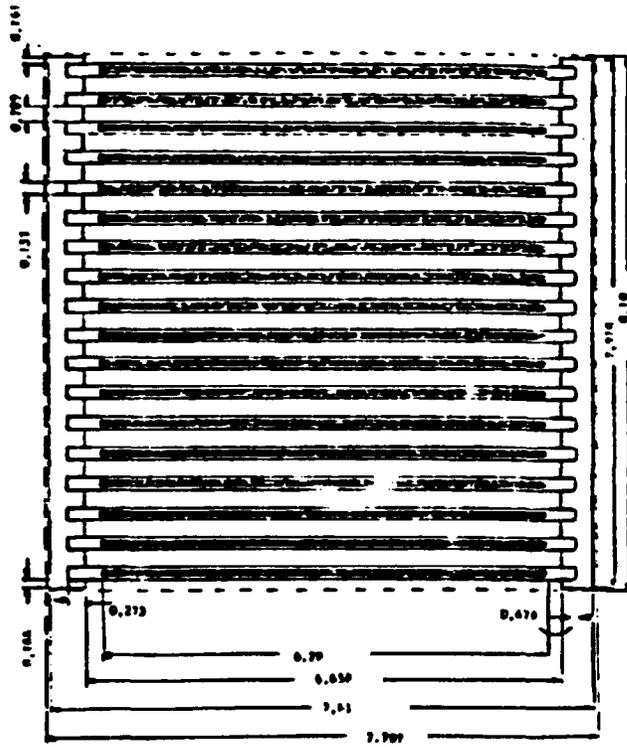


Figura 9: Seção radial do elemento combustível padrão americano.

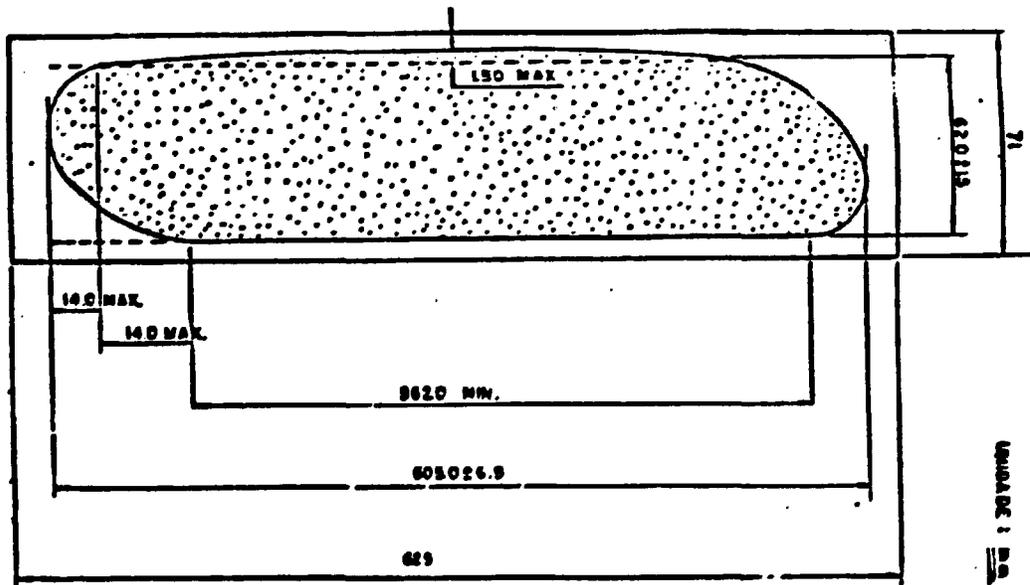


Figura 10: Seção axial de uma das placas combustíveis.

7.2 - METODOLOGIA DE ANÁLISE COM O PROGRAMA MCNP

O elemento combustível foi conservativamente considerado não irradiado, dado que a estocagem de elementos novos nestes cofres pode ocorrer no caso de serem defeituosos. Os cofres cujos raios não puderam ser medidos por estarem lacrados também foram conservativamente considerados grandes, já que as plantas originais dos cofres do IEA-R1 não foram encontradas.

Para a simulação exata de um elemento combustível, conforme mostram as Figuras 9 e 10, necessita-se de 57 células e 84 superfícies. Para a simulação geométrica do arranjo da Figura 11, que mostra um corte de um dos cofres de 8,0 cm de raio, são necessárias 63 células e 94 superfícies, incluindo as superfícies na direção axial. Desse modo, a representação explícita dos 50 cofres conforme a Figura 8 exigiria uma quantidade proibitiva de cartões de entrada para células e superfícies. A fim de diminuir a quantidade de dados de entrada procurou-se homogeneizar o elemento combustível.

O procedimento ideal seria a utilização de parâmetros homogeneizados gerados a partir de uma célula com representação geométrica adequada. Ocorre que o programa MCNP não permite de maneira fácil a entrada de seções de choque geradas externamente por cálculos separados. A possibilidade de se utilizar seções de choque de outros programas foi estudada e descartada por ser extremamente complicado o formato de entrada dos arquivos de seções de choque.

- 1) Elemento Combustível
- 2) Alumínio
- 3) Água
- 4) Aço Inox
- 5) Chumbo
- 6) Concreto

Condição de Contorno:

Vácuo

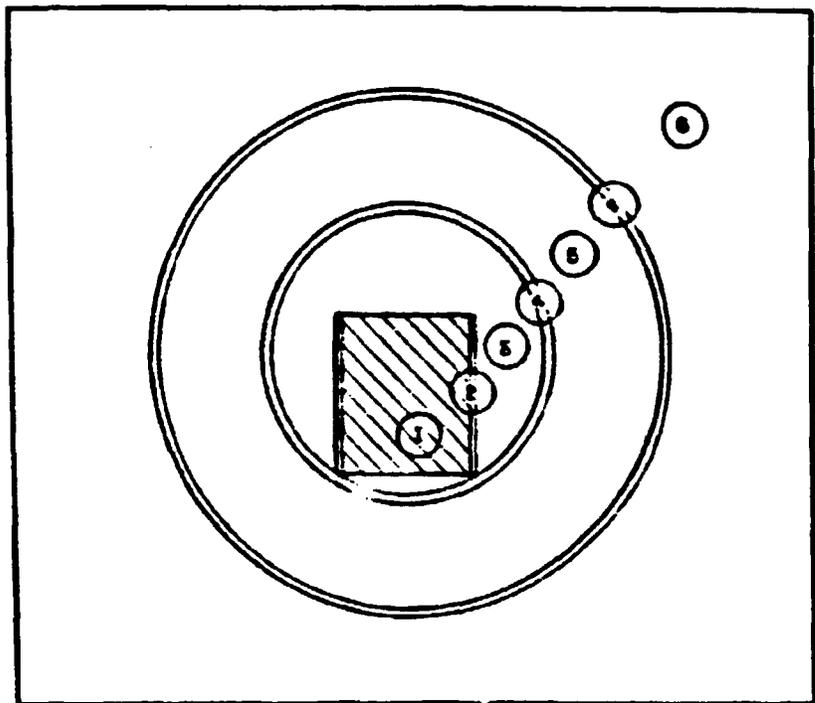
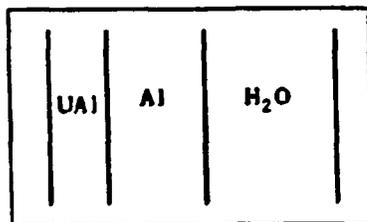
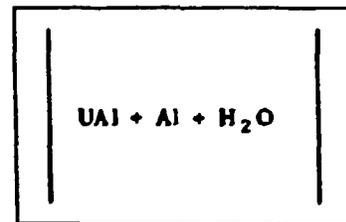


Figura 11: Vista em corte de um dos cofres de estocagem com raio de 8,0 cm.

Dessa forma, para avaliar a homogeneização das seções de choque do elemento combustível, foram comparados os resultados fornecidos pelo MCNP para a célula real e para a célula homogeneizada com os obtidos com o código HAMMER-TECHNION para uma célula unitária do elemento combustível. A Figura 12 ilustra as células consideradas.



a) Célula unitária combustível



b) Célula unitária homogeneizada

Figura 12: Células unitárias consideradas pelos códigos MCNP e HAMMER-TECHNION.

Não se buscou aqui a condição de moderação ótima, mas sim aquela conseguida com a inundação do elemento. Os seguintes resultados foram obtidos:

a) Célula unitária com geometria real:

HAMMER-TECHNION: $K_{\infty} = 1,697072$

MCNP: $K_{\infty} = 1,7010 \pm 0,0017$

b) Célula unitária com geometria homogeneizada:

HAMMER-TECHNION: $K_{\infty} = 1,710607$

MCNP: $K_{\infty} = 1,7145 \pm 0,0022$.

Dessa forma, o MCNP forneceu resultados bastante próximos aos obtidos com o HAMMER-TECHNION.

A seguir foi feita a simulação da Figura 11 com o combustível homogeneizado. Para esta simulação foram necessárias apenas 9 células e 18 superfícies, contra as 63 células e 94 superfícies utilizadas na simulação com o combustível descrito explicitamente como nas Figuras 9 e 10. Neste caso, a homogeneização consistiu em misturar os núcleos que aparecem nas placas, bem como a água entre elas, no volume do elemento combustível.

Obteve-se para a simulação explícita do elemento combustível

$$K_{EF} = 0,3849 \pm 0,0227$$

e para a simulação do combustível homogeneizado

$$K_{EF} = 0,3853 \pm 0,0152$$

Portanto, a homogeneização forneceu resultado semelhante à simulação explícita dentro do desvio padrão. O valor nominal do K_{EF} homogeneizado produziu um pequeno grau de conservantismo.

O resultado anterior era esperado devido ao fato de a heterogeneidade aumentar a reatividade de sistemas com enriquecimento menor que aproximadamente 6% em U-235. Para um sistema com alto enriquecimento, a homogeneização favorece a reatividade por diminuir a auto-blindagem no combustível.

7.3 - RESULTADOS DA ANÁLISE DE CRITICALIDADE

A simulação completa dos 50 cofres de estocagem (Figura 8) preenchidos conforme o seu tamanho com 3 ou 9 elementos homogeneizados e inundados por água consumiu 318 células e 437 superfícies. As seguintes técnicas foram utilizadas após um período de testes de sensibilidade em cada um dos parâmetros:

a) Bibliotecas de Seções de Choque: Os dados dos nuclídeos, quando disponíveis no MCNP, foram obtidos da ENDF/B-IV a 300 K. Nos outros casos foi utilizada a ENDL 85, na qual os dados são processados a 0 K. Todos os dados, com exceção dos dados para o Hidrogênio, foram obtidos através das bibliotecas contínuas. Para o hidrogênio foi utilizada uma biblioteca discreta em 262 grupos proveniente do ENDF/B-IV e tratamento térmico $S(\alpha, \beta)$ nas regiões onde ele se encontra.

b) Técnicas de Redução de Variância: As técnicas utilizadas foram a técnica da importância da célula, considerando importância igual a 1,0 para o elemento combustível, 0,8 para a água e para a camada interna de aço inox, 0,6 para o chumbo e a camada interna de aço inox e 0,3 para o concreto; e a técnica de corte por energia, com limites superiores e inferiores respectivamente iguais a 20,0 MeV e 0,025 eV.

Neste caso, o seguinte resultado foi obtido:

$$K_{eff} = 0,6821 \pm 0,0073$$

7.4 - COMPARAÇÃO COM O KENO-IV

A simulação com o pacote geométrico tradicionalmente utilizado no programa KENO-IV não permite uma representação exata do problema. Desse modo foram considerados dois problemas diferentes:

a) Todos os cofres possuindo 8,0 cm de raio (conforme a Figura 11), denominados "cofres pequenos";

b) Todos os cofres considerados grandes e contendo 9 elementos combustíveis conforme a Figura 7. O conjunto de 9 elementos foi aproximado como um paralelepípedo e foi simulado apenas um cofre com reflexão especular em todas as faces. Este caso é denominado "cofre grande".

O sistema foi estudado de quatro maneiras diferentes:

- a) Usando o MCNP;
- b) Usando o KENO-IV com a biblioteca Hansen-Roach;
- c) Usando o esquema HAMMER-TECHNION - KENO-IV;
- d) Usando a interface GAMTEC-II - KENO-IV.

Nos casos em que se utilizou o HAMMER-TECHNION ou o GAMTEC-II para gerar seções de choque para o KENO-IV, variou-se o "buckling" geométrico introduzido nos dados de entrada dos dois primeiros códigos da seguinte maneira:

$B^2 = 3087 \text{ m}^{-2}$ → "buckling" calculado pela teoria da difusão para três elementos enfileirados.

$B^2 = 82,0 \text{ m}^{-2}$ → "buckling" do IEA-R1.

$B^2 = 10^{-9} \text{ m}^{-2}$ → "buckling" representando um sistema sem fuga.

A Tabela 17 mostra os resultados obtidos e repete os já apresentados na Seção 6.2.

Tabela 17. Resultados finais obtidos na análise de criticalidade.

CÓDIGO	CARACTERÍSTICA	$K_{eff} \pm \sigma$	
MCNP	1 Cofre Isolado e Pequeno	0,3853 \pm 0,0152	
	Todos os 50 Cofres	0,6821 \pm 0,0073	
KENO-IV (HANSEN-ROACH)	Todos os Cofres Pequenos	0,3918 \pm 0,0031	
	Cofre Grande	0,8868 \pm 0,0042	
KENO-IV (HAMMER-TEC)	Cofres Pequenos	$B^2 = 3067 \text{ m}^{-2}$	0,3324 \pm 0,0033
		$B^2 = 82,0 \text{ m}^{-2}$	0,4295 \pm 0,0040
		$B^2 = 10^{-8} \text{ m}^{-2}$	0,4371 \pm 0,0036
	Cofre Grande	$B^2 = 82,0 \text{ m}^{-2}$	0,8442 \pm 0,0037
KENO-IV (GAMTEC-II)	Cofres Pequenos	$B^2 = 3067 \text{ m}^{-2}$	0,4135 \pm 0,0034
		$B^2 = 82,0 \text{ m}^{-2}$	0,4150 \pm 0,0033
		$B^2 = 10^{-8} \text{ m}^{-2}$	0,4176 \pm 0,0040
	Cofre Grande	$B^2 = 82,0 \text{ m}^{-2}$	0,9117 \pm 0,0046

Observando esta tabela percebe-se que os resultados do KENO-IV superestimam os resultados do MCNP. Isto ocorre porque o pacote geométrico do KENO-IV não permite uma fácil representação do sistema completo, e nem ao menos a representação de um cofre de 10,5 cm de raio. Além disso, o MCNP trabalha com seções de choque contínuas, enquanto que as seções de choque fornecidas ao KENO-IV são discretas e numa estrutura de 16 (Hansen-Roach), 15 (GAMTEC-II) ou 4 (HAMMER-TECHNION) grupos de energia.

Observa-se também que o caso c) (com o HAMMER-TECHNION) fornece resultados bem diferentes de acordo com o "buckling" geométrico utilizado. Isto indica a necessidade de estimar corretamente o "buckling" real do sistema considerado para ser introduzido no HAMMER-TECHNION. Nos dois últimos casos, o valor $B^2 = 10^{-8} \text{ m}^{-2}$ é um artifício para simular uma situação de fuga de nêutrons. Por outro lado, o valor $B^2 = 3067 \text{ m}^{-2}$ é uma aproximação para a fuga real, pois a Teoria de Difusão não é válida no sistema considerado. Isto porque o comprimento de migração dos nêutrons é da ordem de 8,1 cm, ou seja, da ordem de um dos lados do sistema real, que é de 8,0 cm. O "buckling" correto é um valor intermediário entre os utilizados. Em vista do exposto, recomenda-se não utilizar o HAMMER-TECHNION para gerar seções de choque para se realizar um cálculo de

criticalidade com o KENO-IV, a não ser que o "buckling" consiga ser corretamente determinado.

Observando novamente a Tabela 17 percebe-se que os resultados obtidos com a interface GAMTEC-II - KENO-IV não são fortemente dependentes do "buckling" geométrico introduzido no GAMTEC-II. Isso mostra que este código é mais apropriado para cálculos de criticalidade com variadas dimensões de sistemas.

Os resultados aqui expostos estão relacionados com o sistema considerado e mostram que todos os métodos de análise apresentam dificuldades ou limitações. Uma análise conservativa devido às dificuldades de modelagem, como as citadas para o programa KENO-IV, podem gerar projetos de equipamentos ou depósito de combustível muito mais caro.

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Durante o transcorrer deste trabalho chegou-se a diversas conclusões sobre os melhores meios de conduzir uma análise de criticalidade. Observou-se que é importante possuir uma metodologia computacional qualificada para ser aplicada nas mais diversas formas, enriquecimentos e composições dos sistemas encontrados no ciclo do combustível nuclear. A metodologia apresentada neste trabalho foi vinculada aos códigos existentes na época de seu desenvolvimento nas instalações do IPEN-CNEN/SP e da COPESP. Uma atenção especial foi dada aos códigos KENO-IV e MCNP.

O KENO-IV foi desenvolvido especialmente para cálculos de criticalidade, sendo sua estrutura e formatação para entrada de dados próprias para esta finalidade. O MCNP, por outro lado, é um código bem mais sofisticado que resolve os mais diversos tipos de problema: envolvendo o transporte de nêutrons e fótons através da matéria. Os resultados apresentados neste trabalho mostram que os dois códigos são adequados para o cálculo do fator efetivo de multiplicação. A seguir são colocadas as principais conclusões e recomendações obtidas:

Pacote Geométrico

O KENO-IV consegue simular várias formas geométricas de forma razoavelmente simples com seu pacote tradicional. Para formas mais complexas, algumas suposições conservativas devem ser feitas, já que o pacote de geometria generalizada é muito difícil de ser utilizado. Deve-se, no entanto, tomar cuidados para que o grau de conservantismo não seja muito elevado a fim de não inviabilizar incorretamente um sistema do ponto de vista da criticalidade nuclear.

A opção geométrica disponível no MCNP é uma de suas mais poderosas ferramentas. A simulação exata do arranjo de 50 cofres de combustível irradiado do IEA-RI comprovou esta sua enorme capacidade para cálculos de criticalidade. Salienta-se que tal simulação exata é impossível de ser feita com o pacote tradicional do KENO-IV.

Apesar da possibilidade de ser feita com exatidão, a simulação geométrica com o MCNP é muito trabalhosa devido ao esquema de células e superfícies que o código utiliza. Além disso, mesmo a simulação de problemas simples geralmente exige do usuário uma cuidadosa preparação dos dados de entrada através da visualização espacial do sistema. Vale salientar, no entanto, que os erros geométricos que possam vir a ocorrer são facilmente detectáveis e indicados pelo código em sua execução. Como sugestão para a análise de criticalidade de sistemas com geometria complexa, aconselha-se utilizar o KENO-IV com as devidas aproximações conservativas. O MCNP deve ser utilizado apenas no caso em que tais suposições inviabilizem um sistema e o responsável por tal análise tenha dúvidas a respeito da real influência destas no resultado obtido.

Seções de Choque

A Biblioteca disponível para o KENO-IV é a Hansen-Roach, que fornece resultados satisfatórios para análise de criticalidade de sistema rápidos ou epitérmicos. Para sistema térmicos, a Hansen-Roach produz resultado 1,9% conservativo para o único sistema de grande porte considerado. Outros dois conjuntos de seções de choque foram utilizados neste trabalho: o conjunto em 15 grupos de energia gerado a partir do GAMTEC-II e o gerado a partir do HAMMER-TECHNION em 4 grupos de energia.

A biblioteca gerada a partir do GAMTEC-II é a indicada para a análise de criticalidade de sistema térmicos. Em sistemas rápidos ou epitérmicos, este conjunto forneceu resultados conservativos cujos desvios em relação ao valor experimental variaram entre 2,7% e 6,5% em K_{eff} . Para sistemas contendo plutônio ele não deve ser utilizado pois fornece resultados incorretos. O resultado obtido pelo KENO-IV praticamente independe do "buckling" geométrico, isto é, da fuga de nêutrons introduzida nos dados de entrada do GAMTEC-II.

As seções de choque geradas a partir do HAMMER-TECHNION e introduzidas no KENO-IV são adequadas para sistemas grandes onde há pouca fuga de nêutrons. Para sistemas pequenos o resultado fornecido pelo KENO-IV depende fortemente do "buckling" geométrico (que representa a fuga de nêutrons) introduzido nos dados de entrada do HAMMER-TECHNION. Dessa forma, este conjunto deve ser utilizado com bastante cuidado.

O MCNP dispõe de vários conjuntos de seções choque contínuas ou discretas em 262 grupos de energia. A escolha do melhor conjunto está vinculada às condições do sistema sob consideração. Em geral, as melhores opções são as bibliotecas oriundas da ENDF/B-IV a 300 K e da ENDF-85 a 0 K. Para sistemas rápidos recomenda-se a utilização de seções de choque contínuas na região físsil. Em sistemas térmicos ou epitérmicos ou no refletor, um conjunto de seções de choque discretas pode reduzir o tempo de computação sem influenciar o resultado obtido. Além disso, em sistemas térmicos e epitérmicos o tratamento $S(\alpha,\beta)$ é fundamental para a obtenção de resultados satisfatórios.

A versão atual do programa MCNP não permite de maneira fácil a entrada de seções de choque provenientes de outros programas. Tal possibilidade foi exaustivamente estudada e descartada devido à complexa formatação exigida pelo código (formato ACE). Nenhum dos programas de geração de seções de choque disponíveis no IPEN-CNEN/SP e na COPESP fornece a saída neste formato.

Condições de Contorno e Técnicas de Redução de Variância

Para o KENO-IV, as técnicas de redução de variância se reduzem à melhor forma de tratar refletores. Para refletores com espessura infinita em termos neutrônicos recomenda-se sempre que possível usar a opção albedo diferencial. Para refletores finitos deste ponto de vista, a opção de reflexão automática também reduz o tempo de computação. Nenhuma destas opções alterou significativamente o resultado obtido em relação ao cálculo feito sem utilizar nenhuma técnica de redução de variância, e ocasionaram uma diminuição razoável no tempo de execução computacional (cerca de metade do tempo para a opção de reflexão automática e um terço do tempo para a opção albedo diferencial).

Como os cálculos realizados pelo MCNP são muito dispendiosos em termos de tempo de computação, torna-se fundamental a utilização de algumas técnicas de redução de variância. A técnica de corte por energia pode ser utilizada em qualquer sistema, e recomenda-se o seu uso em sistemas térmicos. Para problemas com refletor aconselha-se utilizar a técnica do "weight window". A técnica da importância da célula deve ser utilizada nos sistemas sem ou com pequena reflexão externa. Neste caso, deve-se prestar atenção especial nas importâncias fornecidas para cada região, já que elas possuem um caráter bastante subjetivo. Esta técnica pode também ser utilizada em refletores espessos nos casos em que a técnica do "weight window" é de difícil utilização.

O tempo de computação requerido para um cálculo com o MCNP foi de cerca de 2 a 5 vezes maior que para um mesmo cálculo com o KENO-IV. O uso de uma técnica de redução de variância satisfatória pode diminuir esta diferença. No entanto, a determinação da técnica mais adequada é difícil e requer bastante experiência do usuário.

Observações Finais

Observou-se que as principais deficiências do KENO-IV são o seu pacote geométrico e suas bibliotecas de seções de choque. São nestes dois pontos que o MCNP mostrou suas vantagens para cálculos de criticalidade. Entretanto, a obtenção de códigos mais recentes da série KENO (KENO-V, KENO-Va ou KENO-VI quando for liberado) já resolveria praticamente todos os problemas geométricos. Por outro lado, um avanço na geração de seções de choque numa estrutura de muitos grupos de energia já vem ocorrendo no IPEN/CNEN-SP através do acoplamento entre os sistemas NJOY e AMPX-II. Atualmente, o processo de obtenção de seções de choque para serem introduzidas no KENO-IV é muito trabalhoso e nem sempre utilizado. Um esforço na otimização desta prática resolveria definitivamente o problema do conjunto de seções de choque utilizado. Em relação ao MCNP, seria importante o desenvolvimento de uma interface de entrada de dados para permitir que este programa leia diretamente as seções de choque geradas em outros programas (formato ACE).

Com estes dois problemas resolvidos, a análise de criticalidade dos diversos sistemas encontrados no ciclo do combustível nuclear será facilitada. Além disso, os resultados obtidos serão bem mais realistas, ou seja, sem a elevada margem de conservantismo encontrada em alguns casos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] KNIEF, R.A. *Nuclear Criticality Safety - Theory and Practice*. American Nuclear Society, 1986.
- [2] THOMAS, J.T. *Nuclear Safety Guide/TID-7016/Revision 2*. U.S. Nuclear Regulatory Commission, 1978. (NUREG/CR-0095 and ORNL/NUREG/CSD-6).
- [3] THOMAS, W.; WARNEMÜNDE, R.; HEINICKE, V. *Handbuch zur Kritikalität*. Gesellschaft für Reaktorsicherheit, 1980.
- [4] AMERICAN NUCLEAR SOCIETY. *American National Standard for Nuclear Criticality Safety in Operations with Fissionable Materials Outside Reactors*. 1983. (ANSI/ANS-8.1/-1983).
- [5] DAWSON, D.M.; WEBB, H.W.; GLOPA, M.A.; STEVENSON, R.L. Moderation Control for Purposes of Criticality Safety. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 24:203-06, 1976.
- [6] PAXTON, H.C.; THOMAS, J.T.; CALLIHAN, D.; JOHNSON, E.B. *Critical Dimensions of Systems Containing ^{235}U , ^{239}Pu and ^{233}U* . U.S. Atomic Energy Commission, 1964. (TID-7028).
- [7] MIHALCZO, J.T. Evaluation of the ^{252}Cf -Source-Driven Neutron Noise Analysis Method for Measuring the Subcriticality of LWR Fuel Storage Casks. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 55:402, 1987.
- [8] HUNT, D.C. A Review of Criticality Safety Models Used in Evaluating Arrays of Fissile Materials. *Nucl. Technol.*, 30:138-65, 1976.

- [9] PRUVOST, N.L.; KOLAR, O.C. *Proceedings of the Livermore Array Symposium* Lawrence Radiation Laboratory, 1968 (CONF-680909).
- [10] PAXTON, H.C. *Criticality Control in Operation with Fissile Material*. Los Alamos National Laboratory, 1972. (LA-3366 - Revision).
- [11] FOWLER, T.B.; VONDY, D.R.; CUNNINGHAM, G.W. *Nuclear Reactor Core Analysis Code*: CITATION: Oak Ridge National Laboratory, 1971. (ORNL-TM 2496 -
- [12] FOWLER, T.B.; TOBIAS, M.L.; VONDY, D.R. *EXTERMINATOR-2: A FORTRAN IV Code for Solving Multigroup Neutron Diffusion in Two Dimension*. Oak Ridge National Laboratory, 1967 (ORNL-4078).
- [13] LITTLE, W.W.; HARDIE, R.W. *2DB Users Manual-Rev.1*. Pacific Northwest Laboratory, 1969 (BNWL-831 Rev.1).
- [14] ENGLE, W.W. *A Users Manual for ANISN: A One-Dimensional Discrete Ordinates Transport Code with Anisotropic Scattering*. Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant, 1967. (K-1693)
- [15] LATHROP, K.D. *DTF-IV - A FORTRAN-IV Program for Solving the Multi-group Equation with Anisotropic Scattering*. Los Alamos National Laboratory, 1965 (LA-3373).
- [16] GREENE, N.M.; CRAVEN, C.W. *XSDRN: A Discrete Ordinate Spectral Averaging Code*. Oak Ridge National Laboratory, 1969 (ORNL-TM-2500).
- [17] PROTSIK, R.; LEFF, E.G.; *Users Manual for DOT2B: A Two-Dimensional Multigroup Discrete Ordinates Transport/Diffusion Code with Anisotropic Scattering*. General Electric Corporation, 1969 (GEAP-13537).

- [18] LATHROP, K.D. *TWOTRAN: A FORTRAN Program for Two-Dimensional Transport*. Gulf General Atomic., 1968 (GA-8747).
- [19] LATHROP, K.D. *The S_n Method*. Los Alamos Scientific Laboratory, 1972 (Y-CDC-11).
- [20] DICKINSON, D.; WHITESIDES, G.E. *The Monte Carlo Method for Array Criticality Calculations*. *Nucl. Technol.*, 30:166-89, 1976.
- [21] WHITESIDES, G.E.; CROSS, N.F. *KENO: A Multigroup Monte Carlo Criticality Program*. Oak Ridge National Laboratory, 1969 (ORNL-4938).
- [22] PETRIE, L.M.; CROSS, N.F. *KENO-IV: An Improved Monte Carlo Criticality Program*. Oak Ridge National Laboratory, 1975 (ORNL-4938).
- [23] WEST, J.T.; PETRIE, L.M.; FRALEY, S.K. *KENO-IV/CG, The Combinatorial Geometry Version of the KENO Monte Carlo Criticality Safety Program*. U.S. Nuclear Regulatory Commission, 1979 (NUREG/CR-0709 and ORNL/NUREG/CSD-7).
- [24] SCALE: *A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation*. Oak Ridge National Laboratory, 1982 (NUREG/CR-0200).
- [25] SCALE: *A Modular Code System for Performing Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation*. Oak Ridge National Laboratory, 1984 (NUREG/CR-0200).
- [26] STRAKER, E.A.; STEVENS, P.N.; IRVING, D.C.; CAIN, V.R. *The MORSE Code - A Multigroup Neutron and Gamma-Ray Monte Carlo Transport Code*. Oak Ridge National Laboratory, 1970 (ORNL-4585).
- [27] IRVING, D.C.; FREESTONE, R.M.; KAM, F.B.K. *OSR: A General Purpose Monte Carlo Neutron Transport Code*. Oak Ridge National Laboratory, 1965 (ORNL-3622).

- [28] Briemeister, J.F. MCNP - *A General Monte Carlo Code for Neutrons and Photons Transport (Version 3A)*. Los Alamos National Laboratory, 1986 (LA-7396-M Rev.2).
- [29] SHERRIFFS, V.S.W. MONK - *A General Purpose Monte Carlo Neutronics Code*. U.K. Atomic Energy Authority, 1978 (SRD-R86).
- [30] STEVENS, P.N. *Monte Carlo Method in Radiation Transport - Vol. 1* Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1984.
- [31] CARTER, L.L.; RICHEL, C.R.; HUGHEL, C.E. *CAMPPEC-II: A Code for Generating Consistent Multigroup Constant Utilized in Diffusion and Transport Theory Calculations*. Pacific Northwest Laboratory Richland, 1965 (BNWL-35).
- [32] BARHEN, J.; ROTHENSTEIN, W.; TAVIV, E. *The HAMMER Code System*. Electric Power Research, 1978 (NP-565).
- [33] DICHLINSON, D. *Calculation Study of Arrays of Cylinders of Fissile Solution*. Rocky Flats Division, 1972 (RFP-1821).
- [34] HANDLEY, G.R.; HOPPER, C.M. *Validation of the 'KENO' Code for Nuclear Criticality Safety Calculations of Moderated, Low-Enriched Uranium Systems*. Union Carbide Corporation, 1974 (Y-1548).
- [35] THOMAS, J.T. *Uranium Metal Criticality, Monte Carlo Calculations and Nuclear Criticality Safety*. Union Carbide Corporation, 1970 (Y-CDC-7).
- [36] HANSEN, G.E; ROACH, W.R. *Six and Sixteen Group Cross Sections for Fast and Intermediate Critical Assemblies*. Los Alamos Scientific Laboratory, 1961, (LAMS-2543).

- [37] MACFARLANE, R.E.; MUIR, D.W.; BOICOURT, P.M. *The NJOY Nuclear Data Processing System, Vol-I: User's Manual*. Los Alamos National Laboratory, 1982 (LA-9393-M).
- [38] GREENE, N.M.; FORD III, W.E. *AMPX-II: A Modular Code System for Generating Coupled Multigroup Neutron-Gamma Libraries from Data in ENDF Format*. Oak Ridge National Laboratory, 1978 (PSR-63).
- [39] KOPPEL, J.U.; HOUSTEN, D.H. *Reference Manual for ENDF Thermal Neutron Scattering Data*. General Atomic Report, 1968 (GA-8774).
- [40] SHIBATA, K. *Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 JENDL-3*. JENDL Compilation Group, 1990 (JAERI-1319).
- [41] WHITESIDES, G.E.; THOMAS, J.T. The Use of Differential Current Albedos in Monte Carlo Criticality Calculations. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 12(2):689, 1969.
- [42] LONG, J.K. Shortcomings of the Albedo Approximation in KENO Calculations. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 17:267-68, 1973.
- [43] LANDERS, N.F.; PETRIE, L.M. Uncertainties Associated with the Use of the KENO Monte Carlo Criticality Codes. In: AMERICAN NUCLEAR SOCIETY. *Safety Margins in Criticality Safety: Proceedings of the International Topical Meeting on ... held in San Francisco, 26-30 November, 1989*. San Francisco, 1990. p.289-96.
- [44] HOWERTON, R.J. *LLL Evaluated Nuclear Data Library (ENDL): Graphs of Cross Sections from the Library*. California University, 1976 (UCRL-50400 Vol.15 Pt.B).
- [45] MORIOKA, S.; HARIYAMA, Y.; KADOTANI, H.; SENDA, M.; TAMURA, K.; SAITO, K. Criticality Safety Analysis with The Monte Carlo Code MCNP. In: *Nuclear Criticality Safety: International Seminar on ...held in Tokio, October, 1987*. Tokio, 1988. p.335-39.

- [46] MORIOKA, S.; HARIYAMA, Y.; KADOTANI, H.; SMITH, N.R. A Comparison Between Criticality Analyses for Unreflected Systems by Monte Carlo Codes MCNP and MONK6A. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 57:131-33, 1988.
- [47] SITARAMAN, S. Benchmarking Study of the MCNP Code Against Cold Critical Experiments. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 63:426-29, 1991.
- [48] BIERMAN, S.R. Critical Experiments - Benchmarks (Pu-U Systems). *Nucl. Technol.*, 26(3):352-81, 1975.
- [49] THOMAS, J.L. Critical Three-Dimensions Arrays of U(93.2) Metal Cylinder. *Nucl. Sci. Eng.*, 52:350-59, 1973.
- [50] ALTER, H.; KIDMAN, R.P.; LABAUVE, R.; PROTSIK, R.; ZOLOTAR, B.A. Cross Section Evaluation Working Group Benchmark Specification. Brookhaven National Laboratory, 1974 (BNL-19302).
- [51] GWIN, R.; MAGNUSON, D.W. The Measurement of Eta and Other Nuclear Properties of U^{233} and U^{235} in Critical Aqueous Solutions. *Nucl. Sci. Eng.*, 12:364-80, 1962.
- [52] SPIELBERG, D. Soil. In: *Engineering Compendium on Radiation Shielding*. International Atomic Energy Agency, 1975. v.2, p.345-46.
- [53] FANARO, L.C.C.B.; MOREIRA, J.M.L. *Acidente de Criticalidade durante Estocagem de Combustível Irradiado no Reator IEA-R1*. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1988.
- [54] MAIORINO, J.R.; PERROTA, J.A.; KOSAKA, N.; SILVA, A.T. *Atualização dos Cálculos da Configuração do IEA-R1 para 2 MW - Dados Padronizados*. Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1988.

APÊNDICE A

DADOS DE ENTRADA DOS CÓDIGOS KENO-IV E MCNP. PARA UM PROBLEMA SIMPLES

A fim de fornecer um exemplo da diferença da simulação de um problema com o KENO-IV e com o MCNP, é apresentada a listagem dos dados de entrada do último caso da Tabela 9 (Capítulo 5). O sistema consiste de um arranjo 2x2x2 de cilindros metálicos enriquecidos em 93,2 wt% em U-235. Ele é crítico quando, ao ser refletido por 15,2 cm de parafina, possui um espaçamento entre as unidades de 23,48 cm na direção horizontal e 22,75 cm na direção vertical (vide Figura 4).

A Figura 13 mostra a listagem dos dados de entrada requerido para que o KENO-IV execute este caso utilizando a opção de reflexão automática e a Figura 14, a listagem requerida para que o MCNP execute um cálculo de criticalidade neste sistema.

Nota-se à primeira vista que a entrada de dados requerida pelo KENO-IV é bem mais simples que a requerida pelo MCNP. Ambos conseguem simular exatamente a geometria do sistema, sendo que o MCNP exige uma visão tridimensional bem mais apurada. O refletor simulado com o MCNP foi subdividido em 5 partes a fim de utilizar a técnica do "weight window" com grupos de energia e pesos iguais aos existentes na opção de reflexão automática do KENO-IV. Na Figura 14, os cartões M1 e M2 referem-se respectivamente às densidades atômicas dos elementos constituintes dos cilindros e do refletor (todos com seções de choque discretas), o cartão PHYS:N é o cartão de corte por energia e o cartão MT2 indica a utilização do tratamento térmico na parafina. Assim, por exemplo, a célula 1 é preenchida pelo material 1, possui densidade atômica de 4.8032461×10^{-2} átomos/barn.cm e é definida pelas intersecções da região interna da superfície 1 (-1) com a região do espaço acima da superfície 5 (5) e com a região do espaço abaixo da superfície 6 (-6).

CASO 5 A=15.2 ; B=23.48 ; C=22.75 ; 30.000; PLANA; KENO; REFLEXAO AUTOMATICA
 150.0 105 300 5 16 6 6 2 6 8 1 3=2 6 2=0 0000 10=0
 1 -92500 4.47964-2 1 92800 2.65763-3 1 92400 4.82709-4 1 92600 9.5722-5
 2 6100 3.96981-2 2 1101 8.25721-2
 CYLINDER 1 5.748 5.3825 -5.3825 16=0.5
 CUBOID 0 11.740 -11.740 11.740 -11.740 11.375 -11.375 16=0.5
 REFLECTOR 2 6=15.2 400
 END KENO

Figura 13: Listagem dos dados de entrada requeridos para o KENO-IV.

CASO 5 - A=15.2 B=23.48 C=22.75 TECNICA DO WEIGHT WINDOW

1	1	4.8032461-2	-1 5 -6
2	1	4.8032461-2	-2 5 -6
3	1	4.8032461-2	-3 5 -6
4	1	4.8032461-2	-4 5 -6
5	1	4.8032461-2	-1 7 -8
6	1	4.8032461-2	-2 7 -8
7	1	4.8032461-2	-3 7 -8
8	1	4.8032461-2	-4 7 -8
9	0	(1:-5:6) (2:-5:6) (3:-5:6) (4:-5:6) (1:-7:8) (2:-7:8)	
		(3:-7:8) (4:-7:8) (9 -11 13 -15 17 -19)	
10	2	1.2227020-1	(-9 : 11 : -13 : 15 : -17 : 19)
			(21 -22 23 -24 25 -26)
11	2	1.2227020-1	(-21 : 22 : -23 : 24 :-25 : 26)
			(27 -28 29 -30 31 -32)
12	2	1.2227020-1	(-27 : 28 : -29 : 30 :-31 : 32)
			(33 -34 35 -36 37 -38)
13	2	1.2227020-1	(-33 : 34 : -35 : 36 :-37 : 38)
			(39 -40 41 -42 43 -44)
14	2	1.2227020-1	(-39 : 40 : -41 : 42 :-43 : 44)
			(10 -12 14 -16 18 -20)
15	0	-10 : 12 : -14 : 16 : -18 : 20	

1	CZ	5.748
2	C/Z	0.0 23.48 5.748
3	C/Z	-23.48 0.0 5.748
4	C/Z	-23.48 23.48 5.748
5	FZ	-5.38250
6	FZ	5.38250
7	FZ	17.3675
8	FZ	28.1325
9	PX	-35.220
10	PX	-50.420
11	PX	11.7400
12	PX	26.9400
13	PY	-11.740
14	PY	-26.940
15	PY	35.2200
16	PY	50.4200

Figura 14: Listagem dos dados de entrada requeridos para o MCNP.

17 PZ -11.375
 18 PZ -26.575
 19 PZ 34.1250
 20 PZ 49.3250
 21 PX -38.220
 22 PX 14.7400
 23 PY -14.740
 24 PY 38.2200
 25 PZ -14.375
 26 PZ 37.1250
 27 PX -41.220
 28 PX 17.7400
 29 PY -17.740
 30 PY 41.2200
 31 PZ -17.375
 32 PZ 40.1250
 33 PX -44.220
 34 PX 20.7400
 35 PY -20.740
 36 PY 44.2200
 37 PZ -20.375
 38 PZ 43.1250
 39 PX -47.220
 40 PX 23.7400
 41 PY -23.740
 42 PY 47.2200
 43 PZ -23.375
 44 PZ 46.1250

WVE:N 1-7 4-7 1-6 3-6 1-5 3-5 1-4 5.5-4 3-3 1.7-2
 0.1 0.4 0.9 1.4 3 20

WVN1:N 0.167 BR 0.297 1.173 4.633 18.200 71.667 -1.0
 WVN2:N 0.167 BR 0.275 1.017 3.967 15.667 61.667 -1.0
 WVN3:N 0.167 BR 0.273 0.990 3.867 15.200 60.000 -1.0
 WVN4:N 0.167 BR 0.256 0.883 3.433 13.500 53.000 -1.0
 WVN5:N 0.167 BR 0.210 0.650 2.493 9.8000 38.667 -1.0
 WVN6:N 0.167 BR 0.216 0.630 2.373 9.3600 36.667 -1.0
 WVN7:N 0.167 BR 0.224 0.627 2.317 9.0330 35.667 -1.0
 WVN8:N 0.167 BR 0.229 0.613 2.190 8.4670 33.233 -1.0
 WVN9:N 0.167 BR 0.228 0.583 2.007 7.6670 30.033 -1.0
 WVN10:N 0.167 BR 0.224 0.543 1.793 6.7330 26.200 -1.0
 WVN11:N 0.167 BR 0.213 0.480 1.487 5.3670 20.633 -1.0
 WVN12:N 0.167 BR 0.198 0.380 0.997 3.1400 10.933 -1.0
 WVN13:N 0.167 BR 0.192 0.324 0.723 1.9330 5.7670 -1.0
 WVN14:N 0.167 BR 0.19 0.305 0.600 1.3900 3.5670 -1.0
 WVN15:N 0.167 BR 0.19 0.291 0.500 0.9570 1.9600 -1.0
 WVN16:N 0.167 BR 0.199 0.282 0.427 0.6930 1.1170 -1.0

WVP:N 9 3 5 0 0

KCODE 1000 1. 2 20

M1 92235.11D 4.47964-2 92238.30D 2.65763-3 92234.10D 4.82709-4
 92236.01D 9.5722-5

M2 1001.04D 8.25721-2 6012.10D 3.96981-2

DRXS

PHYS:N 20.0 2.50-8

MT2 POLY.01T

PF:INT

Figura 14: Listagem dos dados de entrada requeridos para o MCNP (continuação).