

ST1-C

MODIFICAÇÃO NO PROGRAMA CITATION : TROCA DE SECÇÕES DE  
CHOQUE MICROSCÓPICAS POR ZONA.

Mitsuo Yamaguchi  
Nanami Kosaka

Instituto de Pesquisas Energéticas e  
Nucleares - CNEN-SP

SUMÁRIO

*Apresentam-se modificações feitas*  
~~O trabalho consiste em introduzir modificações~~ no programa 'CITATION para calcular a queima acumulada para cada zona do reator em cada passo de queima e permitir a troca de secções de choque microscópicas para cada zona de acordo com a queima acumulada após cada passo de queima. Alguns dados de entrada foram introduzidas no programa. As alterações foram testadas e os resultados comparados com e sem as modificações.

## 1. Introdução

O programa CITATION [3] vem sendo largamente utilizado pelos pesquisadores da Divisão de Física de Reatores para os cálculos neutrônicos. É um programa poderoso com a capacidade de fazer inúmeros cálculos, tais como queima de combustível, recarga de combustível, pesquisa de criticalidade, de veneno queimável, de dimensão e concentração críticas, etc. Esses cálculos são feitos em multi-grupo, em uma, duas ou três dimensões usando a teoria de difusão e método de diferenças finitas.

Apesar de toda essa capacidade, ainda há necessidade de algumas modificações para torná-lo mais versátil e poder representar com mais precisão o comportamento real do reator. Parâmetros como queima, densidade de água, temperatura do combustível influem nas secções de choque microscópicas; desse modo há necessidade de se fazer correções nas secções de choque com a variação desses parâmetros.

Neste trabalho mostra-se a influência da queima nas secções de choque microscópicas, a qual ocasionou as modificações no programa CITATION. Com essas modificações, tornou-se possível ao programa fazer trocas de secções de choque microscópicas após cada passo de queima de acordo com a queima acumulada em cada zona do reator.

## 2. Sequência do Trabalho

O objetivo principal das modificações introduzidas no CITATION, nessa fase, foi torná-lo mais eficiente nos cálculos que envolvem queima de combustível.

A figura 1 mostra a variação das secções de choque microscópicas com a queima [1]. Após alguns passos de queima ("burnup time step"), cada zona do reator apresentará diferentes queimas; assim é preciso utilizar a secção de choque de acordo com a queima de cada zona.

O trabalho foi desenvolvido da seguinte maneira :

- a) cálculo da queima média acumulada (em MWD/T) para cada zona e para cada passo de queima;
- b) leitura da tabela de secções de choque microscópicas versus queima para cada enriquecimento inicial do combustível;

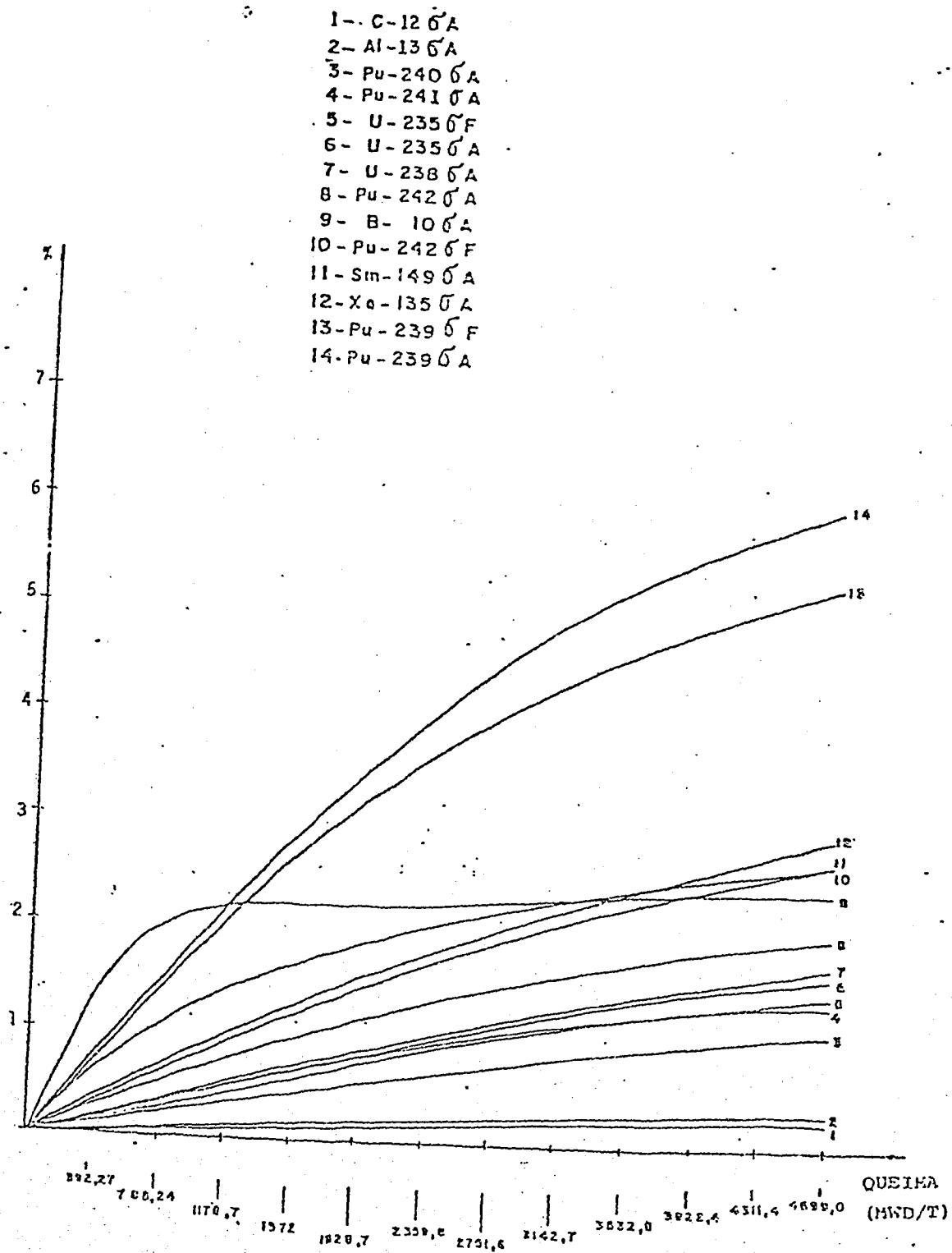


Figura 1 - Variações percentuais das secções de choque microscópicas com a queima.

- c) troca dos conjuntos de secções de choque microscópicas em cada zona após cada passo de queima de acordo com a queima acumulada nessa zona; e
- d) teste e validação das modificações.

A troca dos conjuntos de secções de choque para cada zona nos cálculos, após cada passo de queima, é feita comparando-se a queima média acumulada desta zona com as queimas correspondentes às secções de choque preparadas pelos programas HAMMER ou LEOPARD, e escolhendo-se o conjunto correspondente à queima mais próxima.

O programa original do CITATION permite, em parte, a troca de secções de choque após cada passo de queima por meio de dados de entrada na secção 002, cartão 6, mas essa troca não considera as diferentes queimas apresentadas nas diversas zonas.

### 3. Cálculo da queima

A queima média acumulada para cada zona é calculada após cada passo de queima pela seguinte expressão :

$$B_{k,i+1} = B_{k,i} + \frac{V_k}{M_k} \rho_{k,i} \Delta T_{i+1}$$

onde:

$B_{k,i+1}$  : queima acumulada da zona k no passo i+1 (MWD/T);

$B_{k,i}$  : queima acumulada da zona k no passo i (MWD/T);

$V_k$  : volume da zona k (cm<sup>3</sup>);

$M_k$  : massa inicial do combustível na zona k (T);

$\rho_{k,i}$  : densidade de potência média na zona k (MW/cm<sup>3</sup>); e

$\Delta T_{i+1}$  : passo de queima (dias).

### 4. Troca de Secções de Choque por Zona

Basicamente o CITATION utiliza duas variáveis para definir os conjuntos de secções de choque que serão utilizados nos cálculos : NXSET e NXODR.

Para um melhor entendimento de como se define as variáveis, convém explicar por meio de um exemplo simples. Seja um reator como mostra a figura 2. Os números 1, 2, 3 e 4 correspondem às zonas de

combustíveis e 5 à zona do refletor. O arquivo 8 contém 6 conjuntos de secções de choque microscópicas para o combustível gerados para as queimas 0, 200, 1000, 2000, 3000 e 4000 MWD/T e 1 conjunto para o refletor.

1	2	5
3	4	5
5	5	5

Figura 2 - Exemplo para a troca das secções de choque.

Assim os dados de entrada na secção 012 devem ser :

<u>NZ1</u>	<u>NZ2</u>	<u>NORD</u>	<u>NDP</u>	<u>NAME</u>
1	4	1	0	Combustível
5	5	7	-1	Refletor

Sem a opção de trocas de secções por zonas, as variáveis NXSET e NXODR ficam :

```

NXSET (1) = 1      ;      NXODR (1) = 1
      (2) = 1      ;      (7) = 2
      (3) = 1
      (4) = 1
      (5) = 7

```

Isso indica que somente as secções de choque dos conjuntos 1 e 7 são colocadas nas respectivas variáveis (ver a subrotina INPT). A escolha das secções de choque é feita da seguinte maneira :

```

DO 1 M = 1, MMAX
NS = NXSET (M)
NR = NXODR (NS)
SIGM (K,M,IT) = CONC(N,M) * SS1 (K,N,NR)

```

onde :

MMAX = número de zonas;  
SIGM = secção de choque macrosópica;

CONC = concentração;  
SS1 = secção de choque microscópica;  
K = grupo de energia;  
IT = tipo de secção de choque macroscópica;  
N = nuclídeo; e  
NR = conjunto de secção de choque.

Quando NR=1, refere-se ao conjunto de secções de choque do combustível, e NR=2, refere-se às secções de choque do refletor.

A troca de secções de choque microscópicas por zona será feita modificando-se, inicialmente, a variável NXODR e, em cada passo de queima, a variável NXSET. Suponha que os dados de entrada no cartão 7 da secção 002 seja :

0,0 200,0 1000,0 2000,0

(nesse caso, dos 6 conjuntos de secções de choque para o combustível gravados no arquivo 8, apenas os 4 primeiros correspondentes a essas queimas são utilizados nos cálculos), então a variável NXODR será:

NXODR (1) = 1  
(2) = 2  
(3) = 3  
(4) = 4  
(7) = 5

Supondo que em um determinado passo de queima, a queima acumulada seja :

QACUM (1) = 1260,0  
(2) = 450,0  
(3) = 710,0  
(4) = 95,0  
(5) = 0,0

a variável NXSET deve ser :

NXSET (1) = 3  
(2) = 2  
(3) = 3  
(4) = 1  
(5) = 7

Em palavras, a zona 1 utilizará as secções de choque do conjunto 3, pois a queima para a qual foi gerado o conjunto 3 é a mais próxima da queima acumulada desta zona; a zona 2 do conjunto 2; a zona 3 do conjunto 3, a zona 4 do conjunto 1 e a zona 5 do conjunto 7.

#### 5. Dados de Entrada

Três dados de entrada foram adicionados nos cartões 2,5 e 7+, da secção 002, que são os seguintes:

Cartão 2 : NDPL24 (70-72) >0 - indica opção para a troca das secções de choque microscópicas de acordo com a queima acumulada por zona em cada passo de queima. Requer o cartão 7+. A opção NDPL12 deve ser igual a zero.

Cartão 5 : JEDG24(70-72) >0 - imprime as queimas acumuladas por zona, em MWD/T.

Cartão 7+ (6E12.0) - entrada dos valores de queima acumulada correspondentes a cada conjunto de secções de choque microscópicas. A quantidade de dados fornecidos neste cartão pode ser menor ou igual ao número de conjuntos gerados para cada enriquecimento. No caso em que for menor, apenas os conjuntos correspondentes às queimas fornecidas neste cartão serão utilizados nas trocas. Um campo em branco indica fim de dados neste cartão.

OBS.: Na secção 012 de dados de entrada, deve-se colocar um número negativo na variável NDP (19-21) para indicar classes de zonas que não ocorrem "depletion". A não observação deste item acarreta erro na execução do problema. Ainda na secção 012, a variável NORD (10-12) deve indicar o conjunto correspondente ao primeiro valor dos dados fornecidos no cartão 7+.

#### 6. Teste e Validação das Modificações

As modificações foram testadas com o programa fornecendo como dados de saída as variáveis NXCON, NXODR e NXSET, que definem os conjuntos de secções de choque microscópicas. Os resultados foram obtidos conforme o esperado de acordo com as explicações feitas na secção 4.

Para efeito de validação das modificações feitas, processou-se problemas e os resultados foram comparados considerando os pro-

gramas com e sem as alterações.

Caso exemplo. Seja um reator como mostra a figura 3.

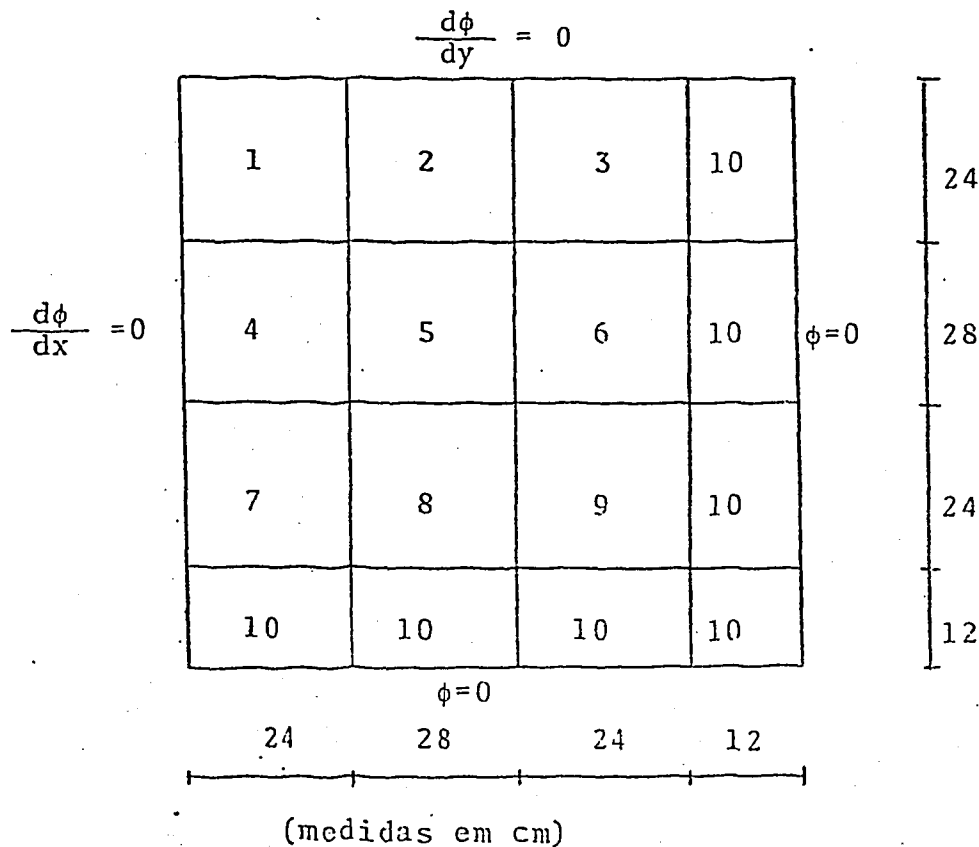


Figura 3 - Caso exemplo.

As zonas 1 a 9 são combustíveis e a zona 10 é refletora (água).

As seções de choque microscópicas (2 grupos de energia) foram geradas pelo código LEOPARD [2], com os seguintes valores de queima para o combustível: 0,200,1000,2000,3000,4000,5000,6000,7000,8000, 9000, 10000,11000 e 12000 MWD/T. São 14 conjuntos para o combustível ( $UO_2$ ) com 4,5% de enriquecimento inicial, 1 conjunto para água + guias, 1 para o aço e 1 para a água. Os conjuntos 15 e 16 não são usados. Os valores da queima correspondem a 14,2 dias para o primeiro passo de tempo ou passo de queima, 56,8 para o segundo e 71 dias para o terceiro e os restantes passos de tempo. As concentrações iniciais dos nuclídeos das zonas combustíveis e refletor são dadas na Tabela 1.

A seguir serão mostrados alguns dos parâmetros mais importantes obtidos com e sem as modificações nas trocas de seções de choque por zona. A Tabela 2 mostra, a título de ilustração, a queima acumulada por zona, obtida com as modificações nas trocas. Nota-se a



Tabela 1 - Concentrações dos nuclídeos

Nuclídeo	Concentração (at./barn.cm)	
	Combustível	Refletor
Hidrogênio	0,02779530	0,05156740
Oxigênio	0,02949240	0,02578370
Ferro	0,00652606	
Níquel	0,00106461	
Cromo	0,00179048	
Manganês	0,00019357	
Urânio-235	0,00035515	
Urânio-236	$0,3390 \times 10^{-10}$	
Urânio-238	0,00744219	
Plutônio-239	$0,3390 \times 10^{-10}$	
Plutônio-240	$0,3390 \times 10^{-10}$	
Plutônio-241	$0,3390 \times 10^{-10}$	
Plutônio-242	$0,3390 \times 10^{-10}$	

Tabela 2 - Queima acumulada por zona (MWD/T)

Passo de Queima	ZONA								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	367	292	151	291	230	119	151	119	61
2	1812	1445	764	1444	1150	606	763	606	316
3	3583	2875	1537	2875	2303	1227	1536	1226	649
4	5303	4291	2321	4290	3463	1864	2321	1864	994
5	6969	5688	3119	5688	4629	2521	3119	2521	1357
6	8582	7067	3930	7067	5798	3197	3930	3197	1738
7	10145	8428	4752	8428	6972	3893	4752	3894	2138
8	11665	9771	5584	9772	8148	4607	5584	4608	2557
9	13147	11099	6424	11099	9326	5537	6424	5538	2992
10	14594	12412	7273	12413	10504	6083	7273	6084	3445

Tabela 3 - Conjunto de secções de choque utilizados em cada passo de queima e  $\nu\Sigma_{f2}$  ( $\text{cm}^{-1}$ ) para as zonas 1 e 9, segundo os métodos antigo (A) e novo (N).

Passo de Queima	ZONA 1				ZONA 9			
	Conjunto		$\nu\Sigma_{f2}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )		Conjunto		$\nu\Sigma_{f2}$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	
	A	N	A	N	A	N	A	N
0	1	1	2,12104(-1)	2,12104(-1)	1	1	2,12104(-1)	2,12104(-1)
1	2	2	2,10895(-1)	2,10895(-1)	2	1	2,10552(-1)	2,12142(-1)
2	3	4	2,14288(-1)	2,13994(-1)	3	2	2,10633(-1)	2,11206(-1)
3	4	6	2,17627(-1)	2,17107(-1)	4	3	2,11205(-1)	2,11430(-1)
4	5	7	2,19848(-1)	2,19390(-1)	5	3	2,11792(-1)	2,12210(-1)
5	6	9	2,21265(-1)	2,20701(-1)	6	3	2,12386(-1)	2,12969(-1)
6	7	11	2,22095(-1)	2,21484(-1)	7	4	2,12986(-1)	2,13422(-1)
7	8	12	2,22487(-1)	2,21977(-1)	8	4	2,13583(-1)	2,14119(-1)
8	9	14	2,22542(-1)	2,22027(-1)	9	5	2,14169(-1)	2,14535(-1)
9	10	14	2,22526(-1)	2,22016(-1)	10	5	2,14732(-1)	2,15152(-1)
10	11	14	2,21882(-1)	2,21785(-1)	11	5	2,15254(-1)	2,15728(-1)

OBS: Os números entre parênteses significam potências de 10.

Tabela 4 - Comparação do fator de multiplicação efetivo e massas do U-235 e Pu-239, para cada passo de queima, entre os métodos antigo (A) e novo(N).

Passo de Queima	K-Efetivo		Massa (Kg)			
			U-235		Pu-239	
	A	N	A	N	A	N
0	1,1819363	1,1819363	3,20234	3,20234	3,10885(-7)	3,10885(-7)
1	1,1549883	1,1549759	3,18512	3,18512	5,69676(-3)	5,69676(-3)
2	1,1422396	1,1421738	3,11727	3,11727	3,44516(-2)	3,44533(-2)
3	1,1317682	1,1314840	3,03510	3,03510	6,75785(-2)	6,75948(-2)
4	1,1207867	1,1208029	2,95559	2,95555	9,78857(-2)	9,79813(-2)
5	1,1098175	1,1098824	2,87842	2,87835	1,25791(-1)	1,25941(-1)
6	1,0991507	1,0994768	2,80337	2,80323	1,51602(-1)	1,51895(-1)
7	1,0886688	1,0893154	2,73026	2,73005	1,75571(-1)	1,75992(-1)
8	1,0787745	1,0795841	2,65895	2,65868	1,97896(-1)	1,98415(-1)
9	1,0692053	1,0700464	2,58934	2,58899	2,18727(-1)	2,19399(-1)
10	1,0599079	1,0607939	2,52133	2,52094	2,38204(-1)	2,38929(-1)

grande diferença nas zonas 1 e 9, que são os dois extremos do reator. A Tabela 3 (A se refere ao CITATION original, utilizando o cartão 6 da secção 002 e N se refere ao CITATION com modificações nas trocas de secções de choque por zona) compara  $v\Sigma_{f2}$  e os conjuntos utilizados em cada passo de queima para as zonas 1 e 9. Nos passos 8,9 e 10 para a zona 1, os conjuntos utilizados são os mesmos, uma vez que só foram gerados 14 conjuntos para o combustível. Finalmente, a Tabela 4 compara o fator de multiplicação efetivo e as massas de U-235 e Pu-239 para cada passo de queima.

## 7. Conclusão

As diferenças notadas na Tabela 4 são relativamente pequenas, mas elas são importantes porque os erros tendem a se propagar. O erro relativo verificado na massa do U-235 no passo 10 é de aproximadamente 0,02%. O mesmo erro se verificará na massa do U-238, pois de acordo com a Figura 1, as variações percentuais nas secções de choque são aproximadamente iguais. A massa do Pu-239, que é originário do U-238, já apresenta um erro relativo de aproximadamente 0,3%. A análise feita aqui é de um modelo de reator muito simplificado. Então, é de se esperar que os erros tendem a crescer com o aumento do tamanho do reator, do número de zonas, do número de passos de queima, e em análises de multiciclos de combustível. Um outro fator que minimizou o erro do exemplo foi o número de conjuntos de secções de choque, pois como pode ser visto nas Tabelas 2 e 3, houve necessidade de se gerar conjuntos até para 15000 MWD/T.

## Referências Bibliográficas

1. BALTAZAR, O. Definições preliminares dos parâmetros do projeto de um reator nuclear experimental de potência, utilizando urânio natural e grafita e refrigerado por gás hélio. São Paulo, Instituto de Energia Atômica, Jul. 1978 (Dissertação e Tese IEA 065).
2. BARRY, R.F. LEOPARD - a spectrum dependent non-spatial depletion code for the IBM-7094. Pittsburg, Penn., Westinghouse Electric Corporation, Sep. 1965. (WCAP-3269-26).

3. FOWLER, T.B.; VONDY, D.R.; CUNNINGHAM, G.W. Nuclear reactor core analysis code : CITATION. Oak Ridge, Tenn., Oak Ridge National Laboratory, Jul. 1971. (ORNL-TM-2496, Rev. 2).