# UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

## FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

# SIMULAÇÃO DO REATOR TRIGA IPR – R1 UTILIZANDO MÉTODOS DE TRANSPORTE POR MONTE CARLO

Autor: Hugo Moura Dalle Orientador: Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi

Tese submetida à comissão de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

CAMPINAS

Julho/2005

all and

Bibliotega central Desenvolvimento Coleção Unicamp



#### FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

Dalle, Hugo Moura

D163s Simulação do reator TRIGA IPR-R1 utilizando métodos de transporte por Monte Carlo / Hugo Moura Dalle.--Campinas, SP: [s.n.], 2005.

> Orientador: Elias Basile Tambourgi. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

 Reatores nucleares. 2. Simulação (Computadores).
 Energia nuclear. 4. Modelos matemáticos. I.
 Tambourgi, Elias Basile. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Titulo em Inglês: TRIGA IPR-R1 reactor simulation using Monte Carlo transport methods Palavras-chave em Inglês: Nuclear reactors, Simulation computer, Nuclear energy e Mathematical models Área de concentração: Sistemas de Processos Químicos e Informática Titulação: Doutor em Engenharia Química Banca examinadora: Alexandre David Caldeira, João Manoel Losada Moreira, Ana Paula Brescancini Rabelo e João Sinézio de Carvalho Campos Data da defesa: 29/07/2005 Tese de Doutorado defendida por Hugo Moura Dalle, em 29 de Julho de 2005 e aprovada pela banca examinadora constituída pelos seguintes doutores:

Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi - UNICAMP - Orientador

Dr. Alexandre David Caldeira – IEAv/CTA

Prof. Dr. Ana Paula Brescancini Rabelo - PUC - Poços de Caldas

Prof. Dr./João Manoel Losada Moreira - CTMSP

Prof. Dr. João Sinézio de Carvalho Campos - UNICAMP

DESENVOLVIMENTO ooleşio Unicamp

Esta versão corresponde à final da Tese de Doutorado defendida por Hugo Moura Dalle, em 29 de Julho de 2005.

Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi - UNICAMP - orientador

Aos meus pais, Ulisses e Márcia.

#### AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi pela orientação no trabalho, confiança e apoio prestado durante seu desenvolvimento.

Aos demais Professores da Faculdade de Engenharia Química que, direta ou indiretamente, contribuíram para que este trabalho pudesse ser realizado.

Ao Dr. Robert Jeraj, do Instituto Jozef Stefan, pela cooperação e ensinamentos na utilização do MCNP.

Ao Dr. Andrej Trkov e Dr. Matjaz Ravnik, do Instituto Jozef Stefan, pelas valiosas discussões técnicas que viabilizaram a realização deste trabalho.

Ao CDTN por possibilitar a realização deste trabalho.

Aos colegas do reator, Rose Mary Gomes do Prado Souza, Zildete Rocha, Amir Zacarias Mesquita, Paulo Fernando de Oliveira, Fausto Maretti e Luiz Otávio Sette Câmara pelo auxílio na realização de experimentos no reator, informações e discussões.

Ao colega Dr. Francisco Junqueira Muniz pelo auxílio com o sistema Unix.

A Lenira Lúcia S. P. Ferreira, Nívea de Almeida Lima e Virgínia Lúcia Rodrigues pelo auxílio com o acervo da biblioteca.

Aos colegas do Serviço de Tecnologia de Reatores pela contínua colaboração.

À Cintia pelo carinho e compreensão nos momentos de ausência e angústia.

#### **RESUMO**

A utilização do método Monte Carlo na simulação do transporte de partículas em reatores nucleares é crescente e constitui uma tendência mundial. O maior inconveniente dessa técnica, a grande exigência de capacidade de processamento, vem sendo superado pelo contínuo desenvolvimento de processadores cada vez mais rápidos. Esse contexto permitiu o desenvolvimento de metodologias de cálculo neutrônico de reatores nas quais se acopla a parte do transporte de partículas, feita com um código de Monte Carlo, ao cálculo de queima e decaimento radioativo. Neste trabalho tal metodologia de simulação é implantada, validada para reatores de pesquisa, notadamente os do tipo TRIGA e finalmente utilizada na simulação neutrônica do reator TRIGA IPR - R1 do CDTN/CNEN. O sistema de códigos empregados é constituído pelos amplamente utilizados códigos MCNP4B (transporte por método Monte Carlo) e ORIGEN2.1 (queima e decaimento radioativo). Apesar dos esforços recentes no sentido de agrupar as duas etapas de cálculo, transporte e queima, em um único código, até o momento esta opção não está disponível e, portanto, um terceiro código é utilizado para realizar o acoplamento transporte/queima. Neste trabalho utilizou-se para tal o código MONTEBURNS. O sistema formado por estes três códigos permitiu obter os parâmetros neutrônicos de interesse do IPR - R1 através apenas de simulação teórica, sem a necessidade de qualquer tipo de ajuste baseado em dados experimentais, em boa concordância com os valores medidos. Dentre os parâmetros calculados estão fluxo de nêutrons nos dispositivos de irradiação, fator de multiplicação de nêutrons efetivo, distribuição de potência, reatividade de barras de controle e excesso de reatividade. Foi também realizada a caracterização isotópica do combustível irradiado do reator. A partir desta caracterização são analisadas opções para o acondicionamento operacional e temporário dos elementos combustíveis gastos quanto aos aspectos de blindagem, remoção do calor residual e criticalidade. Em todo o trabalho fica muito clara a preocupação com a checagem dos resultados da simulação com o sistema MONTEBURNS. Assim os parâmetros calculados para os dispositivos de armazenamento do combustível irradiado, para os quais não existem resultados experimentais, foram simulados também com o sistema SCALE4.4A a fim de permitir uma comparação independente de resultados, ainda que ambos resultados teóricos.

<u>Palavras-chave</u>: Monte Carlo, reatores de pesquisa, TRIGA, física de reatores, MCNP, ORIGEN, MONTEBURNS.

#### ABSTRACT

The use of Monte Carlo methods in particles transport simulations of nuclear reactors is growing fast and constitutes a strong tendency all over the world. The major inconvenient of such technique is the huge demand of processing power which has been surpassed by the continuous development of powerful processors. Such situation has allowed the development of reactor physics calculation methodologies in which the particles transport part, made by a Monte Carlo transport code, is linked with the burnup and radioactive decay part of the simulation. On this work a such simulation methodology is made operational, validated for research reactors, mainly for TRIGA reactors and finally utilized for reactor physics simulation of the CDTN's TRIGA IPR - R1. The adopted codes system is constituted by the widespreadly used codes MCNP4B (Monte Carlo transport) and ORIGEN2.1 (burnup and radioactive decay). In spite of the very recent efforts toward get together both, transport and burnup, in only one code at the moment this is a not available option and therefore, a third code is needed to carry out the linkage transport/burnup. MONTEBURNS code was used to this purpose. This three codes system has allowed to obtain the physical parameters of IPR - R1 calculated using only theoretical simulation without any kind of experimental adjustment or interaction between experiments and calculation in good agreement with measured values. Among the calculated parameters are neutron fluxes in the reactor irradiation devices, effective neutron multiplication factor, power distribution, control rods reactivity worth and core reactivity. In addition, the isotopic characterization of the burned fuel was determined and then, two options to deal with the spent fuel elements, guaranteeing their safe operational and interim storage from point of view of criticality safety, shielding and heatload removal, were analyzed. The checking of the MONTEBURNS results always deserved special concern. Thus, the calculated parameters of the spent fuel storage devices that have not any measured value available for comparison were also simulated with the SCALE4.4A system in order to permit an independent comparison of the results, even both being theoretical results.

Key words: Monte Carlo transport, research reactor, TRIGA, reactor physics, burnup, MCNP, ORIGEN, MONTEBURNS.

## SUMÁRIO

N	OMENCLATURA	xiii
1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	9
	2.1 Reatores Nucleares de Pesquisa	9
	2.2 Reator TRIGA IPR – R1	9
	2.2.1 Descrição do Reator	10
	2.2.2 Elementos Combustíveis	12
	2.2.3 Elementos não Combustíveis no Núcleo	15
	2.3 Simulação Neutrônica do Reator TRIGA IPR - R1	15
	2.4 Métodos de Transporte de Partículas por Monte Carlo	17
	2.4.1 Histórico e Características Gerais de Monte Carlo	19
	2.4.2 Introdução ao Método de Transporte por Monte Carlo	21
	2.4.2.1 Probabilidade das variáveis aleatórias contínuas	23
	2.4.2.2 Geração de números aleatórios	24
	2.4.2.3 Geração de variáveis aleatórias	26
	2.4.2.4 Estimação dos resultados	27
	2.4.2.5 Avaliação dos erros	28
	2.4.3 A Estimativa do Fluxo de Nêutrons por Monte Carlo	29
	2.4.4 A Estimativa do Fator de Multiplicação de Nêutrons por Monte Carlo	30
	2.4.5 Sumário do Transporte de Partículas por Monte Carlo	32
	2.5 O Acoplamento da Análise Neutrônica por Monte Carlo à Análise de Queima	a do
	Combustível Nuclear	33

3	METODOL	.OGIA
---	---------	-------

METODOLOGIA	39
3.1 "Cluster" de Microcomputadores	39
3.1.1 Sistema Operacional	41
3.1.2 Ferramentas	41
3.1.3 PVM – "Parallel Virtual Machine"	41
3.2 Os Códigos Nucleares	42
3.2.1 MCNP – Cálculos de Transporte por Monte Carlo	42
3.2.2 ORIGEN – Cálculo de Evolução Isotópica	45
3.2.3 MONTEBURNS – Acoplamento do Cálculo de Transporte por M	onte Carlo
ao de Evolução Isotópica	49
3.2.4 SCALE - Simulação Independente das Opções de Armazenament	0
Temporário do Combustível Gasto	54
3.3 A Validação do MONTEBURNS	56
3.3.1 Cálculo de $k_{eff}$ de Reatores TRIGA	56
3.3.2 Experimento para Medida de Queima de U235 em Placas MTR co	m
Combustível U <sub>3</sub> Si <sub>2</sub> -Al Irradiado	56
3.4 A Simulação do Reator TRIGA IPR – R1	58
3.4.1 Do Início de Vida (BOL) ao Núcleo Atual	59
3.4.2 Núcleo EOL – Fim de Vida	65
3.4.3 Parâmetros para Comparação de Resultados	66
3.5 Opções para o Armazenamento Temporário do Combustível Gasto	67
3.5.1 Casco Duplo Propósito – Estocagem a Seco, TRIGA e MTR	67
3.5.1.1 Critérios de projeto	68
3.5.1.2 Dados dos elementos combustíveis	69
3.5.1.3 Modelamento da geometria e materiais do casco	70
3.5.1.4 Blindagem	72

	3.5.1.5 Criticalidade	74
	3.5.1.6 Térmica – calor de decaimento	75
	3.5.2 Poços – Estocagem Úmida, TRIGA	76
	3.5.2.1 Blindagem	78
	3.5.2.2 Criticalidade	79
	3.5.2.3 Térmica – calor de decaimento	79
4	RESULTADOS E ANÁLISE	81
	4.1 MCNP4B e o Processamento Paralelo em um "Cluster" Linux	81
	4.2 A Validação do MONTEBURNS	83
	4.2.1 Cálculo do $k_{eff}$ de Reatores TRIGA	83
	4.2.2 Simulação da Queima de U235 em Placas de um Elemento MTR com	
	Combustivel U <sub>3</sub> Si <sub>2</sub> -Al Irradiado	86
	4.3 A Simulação do Reator TRIGA IPR – R1	90
	4.3.1 Início de Vida e Núcleos Subseqüentes	91
	4.3.1.1 O veneno queimável	91
	4.3.1.2 Excesso de reatividade e reatividade de barras de controle	94
	4.3.1.3 Comparações com resultados experimentais e com cálculos por	
	difusão	97
	4.3.2 Núcleo Atual - Configuração com 63 Elementos Combustíveis	102
	4.3.2.1 Reatividades	102
	4.3.2.2 Fluxo neutrônico	103
	4.3.2.3 Distribuição de potência	109
	4.3.2.4 Caracterização da queima do combustível	111
	4.3.3 Núcleo EOL – Fim de Vida	113
	4.3.3.1 Reatividades	113

	4.3.3.2 Caracterização do combustível	114	
	4.4 Opções para o Armazenamento Temporário do Combustível Gasto	116	
	4.4.1 Casco Duplo Propósito – Estocagem a Seco, TRIGA e MTR	116	
	4.4.1.1 Criticalidade	117	
	4.4.1.2 Determinação das fontes de radiação e de calor de decaimento	119	
	4.4.1.3 Blindagem	120	
	4.4.1.4 Térmica – calor de decaimento	124	
	4.4.2 Poços – Estocagem Úmida, TRIGA	125	
	4.4.2.1 Criticalidade	125	
	4.4.2.2 Blindagem	127	
	4.4.2.3 Térmica – calor de decaimento	128	
5	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	129	
RE	FERÊNCIAS	132	
AP	ÊNDICE I	138	
	Benchmark Measurements and Calculations of U <sub>3</sub> Si <sub>2</sub> -Al MTR Fuel Plates with E	Burned	
	Fuel	138	
AP	ÊNDICE II	158	
	Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR - R1 Research Reactor Using	g	
	Monteburns Code	158	
AP	ÊNDICE III	168	
Shielding and Criticality Safety Analyses of a Latin American Cask for Transportation			
	and Interim Storage of Spent Fuel From Research Reactors 1		

## NOMENCLATURA

Símbolo	Descrição	Unidade SI
Α	área	m <sup>2</sup>
Ε	energia	J
Fi	taxa de alimentação contínua do nuclídeo i	
f <sub>ik</sub>	fração da absorção de nêutrons por outros nuclídeos que leva à	
	formação do nuclídeo i	
$F_x(x)$	função de distribuição de probabilidade acumulada	
$f_x(x)$	função densidade de probabilidade	
k <sub>eff</sub>	fator de multiplicação de nêutrons efetivo	
lij	fração da desintegração radioativa de outros nuclídeos que leva	
	à formação do nuclídeo i	
Mi	massa atômica do isótopo i	
m	massa	kg
Ν	número total de eventos probabilísticos	
Ν	número de nuclídeos	
n	número de eventos probabilísticos observados	
Na	número de Avogadro	
Ni	densidade atômica do isótopo i	m <sup>-3</sup>
Р	potência térmica	W
P()	probabilidade	
Q	energia média recuperável por fissão	J
R	taxa de reação	s <sup>-1</sup>
R, r	raio	m
r	vetor posição	and the
r <sub>i</sub>	taxa de remoção contínua do nuclídeo i do sistema	
R <sub>n</sub>	número aleatório	
t	tempo	S
V	volume	m <sup>3</sup>
v	velocidade	m/s
W	número de partículas	
$\mathbf{W}_{\mathbf{i}}$	fração de massa do isótopo i	
Х	variável aleatória	
$X_i$	densidade atômica do nuclídeo i	m <sup>-3</sup>
$\overline{x}$	valor médio de uma variável aleatória	aug. 1000
00	infinito	

Símbolo	Descrição	Unidade SI
Símbolos Gr	regos	
β	Bias	
$\phi_{\rm V}$	fluxo de nêutrons no volume V	$m^{-2}.s^{-1}$
$\eta(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)$	densidade angular de nêutrons	m <sup>-3</sup> sr <sup>-1</sup> J <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
$\lambda_i$	constante de decaimento do nuclídeo i	s <sup>-1</sup>
ν	número médio de nêutrons criados por fissão	
$\overline{V}$	número médio de nêutrons criados por fissão	
π	Número pi	
ρ	reatividade	
ρ	massa específica	kg/m <sup>3</sup>
$ ho_a$	densidade atômica	m <sup>-3</sup>
σ	seção de choque microscópica	m <sup>2</sup>
σ	desvio padrão	
$\sigma^2$	variância	
$\sigma_k$	seção de choque de absorção de nêutrons pelo nuclídeo k	m <sup>2</sup>
Σ	seção de choque macroscópica	$m^{-1}$
Ω	vetor direção	
٤	número aleatório	
$\psi(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)$	fluxo angular de nêutrons	$m^{-2}.s^{-1}$

### NOMENCLATURA

#### **Subscritos**

eff	efetivo
Ì	Nuclídeo ou isótopo i
k	Nuclídeo ou isótopo k
V	volume

## Siglas

ABACC	Agência Brasileiro-Argentina de Contabilidade e Controle de
	materiais salvaguardados
ADS	Accelerator Driven System
AIEA	Agência Internacional de Energia Atômica
ANSI	American National Standards Institute
BOL	Begin Of Life
BWR	Boiling Water Reactor
CANDU	Canadian Deuterium Uranium

### NOMENCLATURA

Símbolo	Descrição
CDTN	Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear
CFR	Code of Federal Regulations
CNEN	Comissão Nacional de Energia Nuclear
CSAS	Criticality Safety Analyses Sequence
EC	Elemento Combustível
ENDF	Evaluated Nuclear Data File
EOL	End Of Life
EUA	Estados Unidos da América
GA	General Atomic
HTAS	Heat Transport Analyses Sequence
IJS	Instituto Jozef Stefan
INEEL	Idaho National Engineering and Environmental Laboratory
IPR - R1	Instituto de Pesquisas Radioativas – Reator 1
JAERI	Japan Atomic Energy Research Institute
LANL	Los Alamos National Laboratory
LMFBR	Liquid Metal Fast Breeder Reactor
MCNP	Monte Carlo N-Particle
MPI	Message Passing Interface
MTR	Materials Test Reactor
pcm	por cem mil
PVM	Parallel Virtual Machine
PWR	Pressurized Water Reactor
RSICC	Radiation Safety Information Computational Center
SAS	Shielding Analyses Sequence
SCALE	Standardized Computer Analyses for Licensing Evaluation
TRIGA	Training Research Isotopes General Atomic
UFMG	Universidade Federal de Minas Gerais
USNRC	United States Nuclear Regulatory Commission
\$	dólar

## CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

O principal objetivo da simulação neutrônica de um reator nuclear é a determinação da distribuição do Fluxo de Nêutrons e do valor do Fator de Multiplicação de Nêutrons Efetivo. As demais variáveis de interesse tais como distribuição de potência, coeficientes de reatividade, valor de reatividade de elementos de controle, excesso de reatividade, etc, são obtidos diretamente a partir do fator de multiplicação de nêutrons ou da distribuição do fluxo. A determinação desses parâmetros é fundamental no projeto de reatores nucleares e permite otimizar e analisar vários aspectos relativos à operação dos reatores além de ajudar a identificar e prevenir possíveis violações das condições seguras de operação (BELL e GLASSTONE, 1970; EL-WAKIL, 1971; DUDERSTADT e HAMILTON, 1976; LAMARSH, 1977<sup>a</sup>; LAMARSH, 1977<sup>b</sup>).

O Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear - CDTN/CNEN - opera desde 1960 o reator nuclear de pesquisas IPR - R1 do tipo TRIGA (Training Research Isotopes General Atomic). Em 1999 foi desenvolvida uma metodologia de cálculo neutrônico para este reator (DALLE et al, 1998; DALLE, 1999; DALLE et al, 2000; DALLE & PEREIRA, 2000; DALLE et al, 2002) baseada nos códigos nucleares WIMSD4 (AHNERT, 1980) e CITATION (FOWLER et al, 1969), a qual permitiu pela primeira vez obter resultados teóricos satisfatórios por simulação neutrônica. Como ocorre em praticamente toda análise neutrônica de reatores a principal ferramenta matemática empregada na simulação foi a Teoria da Difusão Multigrupo. Contudo, também o método de transporte por Monte Carlo pode ser empregado na determinação dos parâmetros neutrônicos de um reator nuclear, sendo em muitos casos a única ferramenta matemática disponível na prática devido à sua grande flexibilidade geométrica. Uma característica que limita a utilização de códigos de Monte Carlo é a necessidade de grandes recursos computacionais, tanto em termos de demanda de memória quanto em velocidade de processamento. A utilização de método Monte Carlo na simulação neutrônica de reatores nucleares é crescente e constitui uma tendência mundial.

A análise neutrônica de um reator nuclear constitui-se fundamentalmente na simulação dos fenômenos de transporte de nêutrons (e fótons, ocasionalmente) em um sistema contendo material físsil e não fissil disposto segundo uma determinada geometria. Os cálculos de transporte de partículas por método Monte Carlo fornecem soluções

#### CAPÍTULO 1 – INTRODUÇÃO

aproximadas para uma grande variedade de problemas matemáticos pela realização de simulações de amostragens estatísticas em um computador. A toda estatística existe um erro associado ao valor médio obtido, a variância, e portanto, para se obter resultados práticos satisfatórios um grande número de simulações deve ser feito a fim de minimizar esse erro. Neste ponto reside a principal desvantagem do método Monte Carlo. As milhares ou milhões de simulações necessárias para que se tenha um erro estatístico reduzido demandam grande poder de computação e conseqüentemente, tempo de processamento. Tipicamente, Monte Carlo é usado em problemas que apresentam geometria tridimensional complicada, materiais dispostos em configurações bastante complexas e quando se deseja estimar as incertezas da simulação. Como Monte Carlo não usa o conceito de "pequenos volumes no espaço" não existem as aproximações médias requeridas para o espaço, energia e tempo, comumente encontradas nas simulações por métodos numéricos (volumes, diferenças e elementos finitos, etc.). Isto é especialmente importante porque permite a representação detalhada de todos os dados físicos, o que leva a uma simulação muito mais precisa, permitindo reduzir consideravelmente o esforço de validação da metodologia de cálculo e dos dados. Devido a todas essas vantagens, à medida que o tempo de processamento necessário para realizar simulações por Monte Carlo for sendo reduzido, quer seja pela evolução das técnicas de programação, quer pela evolução dos compiladores, sistemas e principalmente hardwares mais poderosos, pode-se antever que Monte Carlo se tornará o padrão em cálculos de transporte de partículas, assumindo o espaço hoje ocupado pela Teoria de Difusão e Transporte.

O processamento paralelo é uma técnica que pode ser explorada a fim de reduzir o tempo de execução dos programas baseados em método Monte Carlo. Grandes computadores paralelos custam milhões de dólares e muitas vezes é possível obter desempenho computacional semelhante rodando programas em uma rede local que conecte os microcomputadores já existentes. Esse processo em que um conjunto de computadores conectados por rede é usado para resolver um único grande problema, conhecido como computação distribuída, permite, na medida em que tem-se conseguido redes locais cada vez mais rápidas, obter um enorme poder computacional a um custo financeiro muito baixo. Esse conjunto de microcomputadores que compõem a rede de computação distribuída é chamado "cluster". "Clusters" de microcomputadores têm tido uso crescente em laboratórios, universidades e empresas. Dominar a implantação e utilização de

"clusters" permite reduzir o tempo de processamento das simulações, e portanto tem papel importante na viabilização e difusão do uso de Monte Carlo em diversas aplicações e ramos da ciência.

Constitui um dos objetivos deste trabalho de tese implantar um sistema de códigos e uma metodologia de cálculo neutrônico baseada no método Monte Carlo. Tal sistema será implantado também no "cluster" e o efeito de diferentes sistemas operacionais, compiladores, número de processadores e formato de bibliotecas de dados sobre o tempo de processamento será avaliado. O sistema de códigos neutrônicos será constituído pelo código de transporte por Monte Carlo MCNP4B (BRIESMEISTER, 1997), pelo código de queima e decaimento radioativo ORIGEN2.1 (CROFF, 1980; CROFF, 1981; LUDWIG, 1999) e a integração entre estes dois será feita com MONTEBURNS (POSTON e TRELLUE, 1999). Tal sistema permite obter diversos parâmetros neutrônicos de interesse em um reator nuclear (inclusive em sistemas e dispositivos geometricamente complexos), tais como, fluxo de nêutrons, fator de multiplicação de nêutrons efetivo, distribuição de potência, valor de reatividade de barras de controle, excesso de reatividade, etc. Permite ainda, obter informações quantitativas sobre a evolução do combustível nuclear ao longo do tempo em que ele é irradiado como a massa dos diferentes isótopos que são criados e destruídos devido à irradiação do combustível e a atividade desse material, bem como, sua radiotoxicidade e calor de decaimento. Essa caracterização do combustível nuclear permite conhecer a composição do combustível irradiado fornecendo dados para subsidiar uma estratégia eficaz de transporte, acondicionamento e deposição do rejeito nuclear.

Uma vez implantada, a metodologia de cálculo deve ser verificada quanto à aplicabilidade e qualidade dos resultados que produz. Esta verificação é chamada validação. Propõe-se fazer a validação do sistema em duas etapas. Primeiro, utilizando os experimentos "benchmark" realizados no reator TRIGA do Instituto Jozef Stefan (IJS) de Ljubljana, Eslovênia (MELE et al, 1994; JERAJ et al, 1997; JERAJ e RAVNIK, 1999; PERSIC et al, 2000; JERAJ et al, 2002; DALLE e JERAJ, 2002). Esses experimentos são bem conhecidos e são considerados um "benchmark" adequado para a validação de códigos neutrônicos e métodos de cálculo para reatores TRIGA (JERAJ e RAVNIK, 1999). A segunda parte do trabalho de validação será focada na queima do combustível e serão utilizados resultados de análise destrutiva e espectrometria de massa de placas de um elemento combustível irradiado no reator de pesquisas argentino RA-3 (MEDINA e

NASSINI, 1990; GOMEZ, 1995; PEREZ, 1995; CNEA, 1995; NOTARI e CALABRESE, 1995; RUGGIRELLO et al, 2002). Este, não é um reator do tipo TRIGA e sim um MTR (Materials Test Reactor), entretanto, oferece a oportunidade única de obter dados experimentais por análise química da queima do combustível em um reator de pesquisas. Os resultados dos cálculos serão então analisados e comparados com os experimentais disponíveis.

Após a validação do sistema de cálculo ele será utilizado na simulação do reator TRIGA IPR – R1 do CDTN. Pretende-se simular os processos neutrônicos do reator de modo a obter resultados teóricos para fator de multiplicação de nêutrons efetivo, excesso de reatividade, reatividade de barras de controle, reatividade de elementos combustíveis, distribuição de potência e fluxo de nêutrons nos dispositivos de irradiação. Para muitas destas variáveis existem resultados experimentais que permitem acompanhar a evolução de seus valores ao longo dos anos de operação do reator (LIMA e ANDRADE, 1969; LIMA e ANDRADE, 1970; GUIMARÃES, 1985; PAIANO e RESENDE, 1995<sup>a</sup>; PAIANO e RESENDE, 1995<sup>b</sup>; SOUZA e RESENDE, 1996; SOUZA e RESENDE, 1997; SOUZA et al, 2001). Os resultados obtidos nas simulações serão analisados e comparados com os experimentais. Será também interessante a comparação com os resultados obtidos nas já mencionadas simulações pela teoria da difusão de nêutrons (com os códigos WIMSD4 e CITATION) e assim verificar vantagens e desvantagens de cada método.

Para muitos parâmetros do reator não existem valores experimentais, os quais, serão pela primeira vez determinados através de simulação. São parâmetros tais como o inventário de material no combustível, a atividade, calor de decaimento e radiotoxicidade dos elementos combustíveis irradiados. Com base nessas informações serão propostos dispositivos e maneiras para o armazenamento provisório dos elementos combustíveis gastos que serão avaliados do ponto de vista de segurança quanto à criticalidade, blindagem das radiações e remoção do calor de decaimento. Esse estudo levará em conta o tempo de vida operacional estimado para o reator considerando o número de elementos combustíveis de que dispõe o CDTN. Ao final de sua vida útil o reator terá vários elementos queimados os quais precisarão ser apropriadamente acondicionados. Como não existem resultados experimentais que permitam avaliar a qualidade das variáveis de queima calculadas e sua influência sobre os parâmetros desses dispositivos para acondicionamento dos elementos queimados propõe-se utilizar o sistema de códigos SCALE (ORNL, 2000) para uma

#### CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO

segunda e independente análise desses dispositivos, uma vez que, este sistema de códigos é quase um padrão mundial para análise de dispositivos para acondicionamento de combustível nuclear irradiado (MONDANEL, 2002). Os resultados de SCALE seriam comparados com os obtidos com MCNP/MONTEBURNS/ORIGEN.

#### Motivação para o Estudo

Para solucionar problemas de Física de Reatores as principais ferramentas matemáticas utilizadas são as Teorias da Difusão e Transporte de nêutrons e o método de Transporte por Monte Carlo. Estas teorias estão implementadas nas dezenas de programas (códigos neutrônicos) já desenvolvidos, testados e usados em diversos institutos, universidades e empresas. Os códigos de transporte por Monte Carlo, geometricamente muito flexíveis, não eram práticos para simular aplicações nucleares em que ocorrem variações de temperatura e mudanças na composição isotópica do combustível. Neste trabalho pretende-se aliar a flexibilidade geométrica dos códigos de Monte Carlo, que torna possível, por exemplo, a modelagem das heterogeneidades presentes nos reatores de pesquisa (dispositivos de irradiação, detectores de nêutrons, etc) com os cálculos de depleção, nos quais a mudança de composição isotópica ocorre. A outra limitante mencionada, variações de temperatura, não será objeto deste estudo uma vez que apenas "bibliotecas de dados prontas" do MCNP serão empregadas nas simulações e a maioria delas foi processada somente para temperaturas de cerca de 300 Kelvin. Contudo, também esta limitação pode ser superada, bastando incluir um código de processamento de seções de choque, por exemplo NJOY (MACFARLANE e MUIR, 1994; MACFARLANE, 1999), no conjunto MCNP/MONTEBURNS/ORIGEN.

O desenvolvimento e a utilização das ferramentas de simulação propostas possibilitam a simulação precisa do reator IPR – R1. Isto pode permitir modificações para otimizar aplicações específicas do reator e incrementar sua utilização como um equipamento para pesquisa, desenvolvimento e produção. Pode-se antever dentre esses ganhos a melhoria na precisão das análises por ativação neutrônica, graças à correta caracterização espectral e espacial do fluxo de nêutrons nos dispositivos de irradiação, estimativas mais precisas sobre a atividade de amostras irradiadas e modificações para otimizar o fluxo de nêutrons em irradiações específicas ou para produção de determinado radioisótopo, além de ganhos de reatividade via gerência do combustível. É importante salientar ainda as possibilidades que se abrirão com a correta caracterização do combustível

#### CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO

irradiado do IPR – R1. Este é um primeiro passo que permitirá avaliar o futuro do reator e tentar responder algumas perguntas básicas, ainda sem respostas: o combustível disponível no CDTN permite operar o reator por quanto tempo? Qual a atividade e o calor de decaimento do combustível após terminada sua vida operacional? Quanto plutônio e outros actinídeos haverá nele? Como armazenar de maneira adequada esses elementos combustíveis irradiados? São questões que obrigatoriamente surgem quando se pensa no descomissionamento de um reator nuclear. Saber as respostas com antecedência permite o planejamento e a tomada de decisões com correção e segurança. Ainda que não se vislumbre desativar o IPR – R1 a curto prazo, deve-se ter em mente que o reator está em operação há quase meio século, tendo já ultrapassado a vida útil normal dos reatores de potência atuais.

Finalmente, cabe dizer que as ferramentas desenvolvidas e utilizadas neste trabalho não se aplicam apenas ao IPR – R1. Espera-se que o conhecimento conquistado seja útil e utilizado em futuras análises de reatores e outros sistemas nucleares que venham a ser demandados pela política nuclear brasileira. O domínio dessa ferramenta extremamente flexível que se apresenta promissora para simulação não apenas de reatores de pesquisa ou de conceitos de reatores já bem estabelecidos, mas é também adequada para a análise dos projetos inovadores que têm sido propostos pela comunidade nuclear como os da Geração IV, reatores rápidos, regeneradores ou até mesmo ADS. A rápida evolução da tecnologia de computadores em poucos anos viabilizará Monte Carlo como o método padrão na análise de reatores.

#### Objetivos do Estudo

Constitui o objetivo geral deste estudo realizar através de metodologia teórica de transporte de partículas por Monte Carlo a simulação neutrônica do reator de pesquisas TRIGA IPR – R1. Para atingir este objetivo geral são definidos os seguintes objetivos específicos:

1. Implantar uma metodologia computacional de simulação neutrônica de reatores nucleares de pesquisa baseada no método Monte Carlo.

2. Validar essa metodologia.

3. Instalar um "cluster" de microcomputadores; nele, implantar os códigos nucleares e efetuar testes que permitam otimizar o sistema a fim de reduzir o tempo de processamento das simulações.

4. Aplicar essa metodologia de cálculo ao reator TRIGA IPR – R1.

5. Comparar os resultados obtidos na simulação com os valores experimentais disponíveis.

 Comparar os resultados obtidos na simulação com resultados de cálculos para o IPR – R1 realizados com códigos de difusão.

 Estimar por quanto tempo será possível operar o IPR – R1 considerando o estoque de elementos combustíveis novos disponíveis no CDTN.

8. Efetuar a caracterização teórica do combustível irradiado do IPR – R1.

9. Propor dispositivos e maneiras adequadas para o armazenamento operacional e provisório dos elementos combustíveis gastos.

10. Realizar a simulação dos dispositivos propostos para armazenamento dos elementos combustíveis gastos e avaliá-los do ponto de vista de segurança quanto à criticalidade, blindagem das radiações e remoção do calor de decaimento.

Ao atingir estes objetivos uma ferramenta para projeto e análise de reatores nucleares extremamente poderosa, acurada e versátil será disponibilizada e diversos parâmetros do reator TRIGA IPR – R1 serão conhecidos permitindo incrementar sua utilização e estabelecer bases para a gerência de seu combustível irradiado.

## **CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

Este capítulo descreve o reator nuclear de pesquisas TRIGA IPR – R1 e faz um breve histórico das simulações neutrônicas já efetuadas para o reator. Em seguida, introduz alguns conceitos básicos do transporte de partículas pelo método Monte Carlo e, finalmente, apresenta um levantamento dos acoplamentos de códigos de Monte Carlo e de queima mais utilizados.

#### 2.1 Reatores Nucleares de Pesquisa

Reatores nucleares são sistemas que permitem iniciar, manter e controlar reações nucleares. Estão presentes em todos os continentes, exceto a Antártida, e são parte da vida de milhões de pessoas. Os reatores de pesquisa são empregados na pesquisa básica e aplicada sendo também um importante equipamento para prestação de serviços. São utilizados por diversas ciências na investigação das propriedades da matéria, desenvolvimento de novos materiais, análises químicas por ativação neutrônica, neutrongrafia, etc. Produzem radioisótopos cada vez mais usados em tratamentos e exames médicos, em aplicações industriais e na agricultura. São também uma ferramenta para treinamento e formação de pessoal.

#### 2.2 Reator TRIGA IPR – R1

Um reator de pesquisas é um equipamento versátil e inexoravelmente surgem instalações multidisciplinares de pesquisa ao seu redor. A história do reator IPR – R1, mostrado na figura 2.1, não é diferente. Comprado pelo então Instituto de Pesquisas Radioativas (IPR) da Escola de Engenharia da UFMG, hoje, Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear (CDTN/CNEN), o IPR – R1 é um reator de pesquisas do tipo TRIGA Mark I projetado e construído pela General Atomic. Instalado no prédio I do CDTN, no Campus da Pampulha em Belo Horizonte, MG, o IPR – R1 atingiu a criticalidade pela primeira vez em 6 de novembro de 1960. Inicialmente, operou em regime permanente de potência a 30 kW térmicos, após 1973 a 100 kW e atualmente a máxima potência de operação atinge 250 kW.

#### CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O IPR – R1 é utilizado para pesquisas em radioquímica, física de reatores, propriedades dos materiais, engenharia ambiental, produção de radioisótopos e treinamento de operadores para a central núcleo-elétrica de Angra dos Reis.



Figura 2.1 – Reator nuclear de pesquisa TRIGA IPR – R1.

#### 2.2.1 Descrição do Reator

Existem várias versões de reatores TRIGA. Em fevereiro de 2003 somavam 42 reatores em operação e outros 2 em construção em 20 países (GA, 2005). O IPR – R1, do tipo Mark I, tem seu núcleo alojado no fundo de um poço e é imerso em água leve desmineralizada, a qual, tem funções de refrigeração do núcleo (por convecção natural), moderação e reflexão de nêutrons e blindagem das radiações.

As dimensões do poço formam um cilindro com 6,625 metros de profundidade e 1,92 metros de diâmetro, conforme a figura 2.2. A estrutura do poço consiste de 5 cilindros coaxiais, sendo o cilindro interno feito em alumínio com 10 mm de espessura, outro com 72 mm de concreto e os outros três com 6,3 mm de aço, 203 mm de concreto e novamente, 6,3 mm de aço.



Figura 2.2 – Poço do reator IPR – R1 (dimensões em mm).

A parte ativa do núcleo contém 91 posições que podem ser preenchidas com elementos combustíveis, barras de controle, fonte de nêutrons, canais para irradiação de amostras e "elementos falsos" de grafite. Essas 91 posições são arranjadas em 6 anéis concêntricos, nomeados anéis A, B, C, D, E e F, com respectivamente 1, 6, 12, 18, 24 e 30 posições (GA, 1960), conforme mostrado na figura 2.3. Revestindo o núcleo há um refletor de grafite em forma de anel medindo 580 mm de altura e 325 mm de espessura. Encapsulado dentro do refletor existe um dispositivo para irradiação de amostras, chamado mesa giratória, contendo 40 tubos cilíndricos nos quais são inseridas as amostras.



Figura 2.3 – Vista radial do núcleo do IPR – R1.

#### 2.2.2 Elementos Combustíveis

Os elementos combustíveis do IPR – R1 constituem-se de barras cilíndricas de aproximadamente 72 cm de comprimento e 3,6 cm de diâmetro. Atualmente o CDTN utiliza dois tipos de elementos combustíveis no carregamento do núcleo do reator. Os elementos do primeiro tipo têm revestimento de alumínio (figura 2.4) e os do segundo revestimento de aço inoxidável (figura 2.5). Cada elemento é constituído por uma mistura homogênea de urânio metálico (combustível) e hidreto de zircônio (moderador de nêutrons), contendo de 8% a 8,5% em peso de urânio enriquecido a 20%. A relação entre o número de átomos de hidrogênio para os de zircônio na liga é de aproximadamente 1,0 para os elementos com revestimento de alumínio e de 1,6 para os elementos com revestimento de aço inoxidável.



Figura 2.4 - Elemento combustível com revestimento de alumínio.

A General Atomic fabrica e vende diversos tipos de elementos combustíveis para TRIGA com diferentes enriquecimentos. quantidade de urânio. razão de Hidrogênio/Zircônio, revestimentos, etc. Os elementos combustíveis revestidos com alumínio possuem nas duas extremidades da parte ativa dois discos de "veneno queimável" formados por tri-óxido de samário em matriz de alumínio e medindo, possivelmente, 35,6 mm de diâmetro por 1,3 mm de espessura. Completando o elemento existe em cada extremidade um tarugo de grafite que atua como refletor axial possuindo o mesmo diâmetro da parte ativa e altura de 10,16 cm (Al) ou 8,81 cm (inox). Os elementos combustíveis revestidos em aço inoxidável possuem em seu centro uma vareta de zircônio com 6,35 mm de diâmetro. As características de ambos os tipos de elementos combustíveis utilizados no IPR – R1 são listadas na tabela 2.1.



Figura 2.5 - Elemento combustível com revestimento de aço-inoxidável.

Tabela 2.1 -	Características	dos elementos	combustíveis	(CDTN.	2000).
				(	

Característica	Tipo Al	Tipo Inox
Comprimento total, mm	722,4	720,6
Diâmetro externo do revestimento, mm	37,3	37,6
Espessura do revestimento, mm	0,76	0,51
Material do revestimento	Al 1100-F	Aço AISI-304
Diâmetro do combustível, mm	35,6	36,3
Comprimento ativo do combustível, mm	355,6	381,0
Composição do combustível	$U$ - $ZrH_{1,0}$	$U$ - $ZrH_{1,6}$
Concentração de Urânio, % em peso	8,0	8,5
Concentração de Zircônio, % em peso	91,0	89,9
Concentração de hidrogênio, % em peso	1,0	1,6
Razão U:Zr:H	0,03:1,0:1,0	0,04:1,0:1,6
Enriquecimento em U <sup>235</sup> , %	20	20
Massa de U <sup>235</sup> , g	~37	~38
Comprimento do refletor de grafita, mm	101,6	88,1
Diâmetro do refletor de grafita, mm	35,6	36,3
Espessura dos discos de samário, mm	1,3	
Folga diametral, mm	0,18	0,28
Área do espaçador, cm <sup>2</sup>	6,84	4,65

#### 2.2.3 Elementos não Combustíveis no Núcleo

Outros elementos "não combustíveis" integram o núcleo do reator. São eles, fonte de nêutrons, elementos de grafite, tubo central e barras de controle. A fonte de nêutrons atual do IPR – R1 consiste de um tarugo de alumínio com as mesmas dimensões dos elementos combustíveis, o qual, encapsula a fonte de Actínio-Berílio. Os elementos de grafite são tarugos de grafite revestidos por alumínio e possuem as mesmas dimensões dos elementos combustíveis de alumínio. Destinam-se a ocupar as posições do reticulado do núcleo que não são preenchidas funcionando, neste caso, como refletor radial. O tubo central é um dispositivo para irradiação constituído por um tubo de alumínio com raio interno de 16,9 mm e 2,1 mm de espessura, posicionado no centro do núcleo (posição A1 da figura 2.3) e permitindo a irradiação de amostras na posição de máximo fluxo de nêutrons. Três barras cilíndricas de Carbeto de Boro ( $B_4C$ ) permitem o controle e o desligamento do reator. As três barras são idênticas e as dimensões são conforme tabela 2.2.

Tabela 2.2 – Características das barras de controle.

Característica	Dimensão (cm)	Material
Comprimento total	51	
Comprimento do absorvedor	38,1	B <sub>4</sub> C
Diâmetro do absorvedor	1,9	
Diâmetro externo do revestimento	2,22	Alumínio
Espessura do revestimento	0,145	
Diâmetro externo do tubo guia	3,8	Alumínio
Espessura do tubo guia	0,3	

#### 2.3 Simulação Neutrônica do Reator TRIGA IPR - R1

Devido à evolução dos microcomputadores verificada na última década do século XX o interesse na simulação dos pequenos reatores dos centros de pesquisa nuclear foi aguçado. Esses centros realizam cálculos para gerência do combustível, otimizações do núcleo, modificações e atualizações nos reatores, cálculo dos coeficientes de reatividade, etc. (IORGULIS e COSTESCU, 1990; BHUIYAN et al, 1992; KULIKOWSKA, 1994; RAVNIK, 1994; MELE, 1994; YAMAGUCHI, 1995; PERSIC e SLAVIC, 1995; REARDEN, 1995; YAMAGUCHI, 1996; YAMAGUCHI, 1997; BOESSERT et al, 1999).

No caso específico do IPR – R1 a necessidade de realizar simulações neutrônicas para o reator surgiu com o projeto de ampliação da potência de operação do reator de 100 kW para 250 kW térmicos. O cálculo dos parâmetros neutrônicos do reator, principalmente aqueles relacionados à segurança, teve de ser realizado e submetido à apreciação do órgão regulador nuclear, que no caso brasileiro é a Comissão Nacional de Energia Nuclear, antes de se proceder a qualquer ampliação de potência. Essa exigência tornou necessário o desenvolvimento de uma metodologia para efetuar a análise neutrônica do reator. Os primeiros registros de trabalhos objetivando desenvolver uma metodologia de cálculo para o IPR – R1 remontam ao início da década de 1970 com CARNEIRO (1972), CARNEIRO e TERRA (1973) e D'ALBUQUERQUE (1974).

A primeira dificuldade encontrada para realizar os cálculos consiste na escassez de dados precisos sobre o reator e suas partes. Normalmente esses dados estão disponíveis na literatura apenas em forma genérica para os reatores de determinada classe. Mesmo o Relatório de Análise de Segurança, específico para o reator e que a princípio deveria conter todos os dados de material e geométricos de interesse, na prática fornece apenas parte das informações. A fonte mais confiável para se obter os dados geométricos é na prática a documentação de projeto, tal como plantas, desenhos mecânicos e especificações de fabricação. Os dados sobre os materiais utilizados no reator podem ser encontrados em relatórios do fabricante ou melhor ainda pela troca de correspondência entre o fabricante e o operador do reator. Ainda assim muitas informações exatas não estão disponíveis como por exemplo densidades de alguns materiais, composição e densidade dos venenos queimáveis, etc. As melhores informações sobre o histórico de operação do reator, em geral, estão nos livros de registros (*log-books*) dos operadores. Em geral, pode-se dizer que tão mais árdua é a tarefa de obter os dados de interesse quanto mais velho for o reator.

Outro obstáculo residia na obtenção de códigos computacionais adequados para a simulação de reatores de pesquisa. A maioria dos códigos disponíveis foi desenvolvida para calcular reatores de potência e não são diretamente aplicáveis a reatores de pesquisa devido às várias particularidades destes, cujos materiais utilizados, geometrias dos elementos e do núcleo e condições de operação são bastante diversos. Uma peculiaridade dos reatores de pesquisa é que, por em geral terem dimensões reduzidas, a fuga de nêutrons é acentuada

tornando de grande importância o tratamento preciso das fugas, o que por si só não é tarefa trivial.

A primeira metodologia de simulação neutrônica do IPR - R1 a apresentar resultados satisfatórios foi desenvolvida por DALLE (1999) e foi empregada na análise neutrônica exigida pelo órgão regulador para licenciar a ampliação da potência do reator. Os resultados obtidos apresentaram boa concordância com resultados experimentais de excesso de reatividade do núcleo, reatividade das barras de controle, coeficiente de reatividade de temperatura e reatividade de elementos combustíveis. Além destas grandezas foram calculadas distribuições de potência para subsidiar a análise termohidráulica do núcleo a 250 kW efetuada por VELOSO (1999). A metodologia baseou-se nos códigos WIMSD4 (cálculo de células) e CITATION (cálculo de núcleo) e portanto na teoria de transporte e difusão de nêutrons, na época, praticamente a única ferramenta teórica viável para esse tipo de simulação. Apesar dos cálculos terem fornecido bons resultados para as variáveis neutrônicas mencionadas essa metodologia de cálculo apresenta limitações, muitas das quais inerentes à teoria da difusão de nêutrons e ao método numérico de solução da equação de transporte/difusão. Simulações por Monte Carlo podem resolver muitas dessas limitações. A seguir, são apresentados de uma maneira simples e breve os conceitos fundamentais deste método.

#### 2.4 Método de Transporte de Partículas por Monte Carlo

Quando uma partícula atravessa um material ela interage com os átomos que constituem este material. Ela é absorvida ou espalhada (sofre colisões que geralmente reduzem sua velocidade/energia) dependendo das seções de choque do material. Esses processos são estatísticos por natureza com a probabilidade de ocorrência determinada por uma seção de choque. Não se pode prever exatamente qual distância uma partícula percorrerá em um material até interagir. Entretanto, pode-se prever a distribuição das distâncias que um grande número de tais partículas percorrerão antes da primeira interação.

A utilização de métodos estatísticos na simulação de certos sistemas físicos e matemáticos funciona tão bem quanto os métodos numéricos convencionais (diferenças finitas, elementos finitos, etc.) funcionam para a solução das equações diferenciais que descrevem esses sistemas. O método de transporte por Monte Carlo fornece soluções

aproximadas para uma grande variedade de problemas matemáticos pela realização de simulações de amostragens estatísticas aleatórias em um computador. A técnica consiste em seguir cada uma das muitas partículas de uma fonte por toda sua "vida" até sua "morte" em alguma categoria (absorção ou fuga). Monte Carlo é aplicado até mesmo em alguns problemas sem nenhum conteúdo probabilístico.

O método pode então ser empregado para simular teoricamente o processo fundamentalmente estatístico da interação de partículas nucleares com a matéria, sendo particularmente usado para problemas complexos que não podem ser modelados por códigos computacionais que adotam métodos determinísticos. Os eventos probabilísticos individuais que definem um processo são simulados seqüencialmente e as *Distribuições de Probabilidade* que governam esses eventos são estatisticamente amostradas para descrever o fenômeno completo. Em geral, a simulação é realizada em um computador porque o número de processos necessários para descrever adequadamente o fenômeno é muito grande. O processo de amostragem estatística é baseado na seleção de números aleatórios.

Utilizando números aleatórios, computadores podem gerar uma história estatística (o registro completo do movimento aleatório de uma partícula desde seu "nascimento" até sua "morte") para a vida de cada partícula em uma análise da sua trajetória intrinsecamente aleatória através do material. Uma partícula pode sofrer muitas interações de espalhamento antes de finalmente ser absorvida por algum material ou escapar do sistema. Números aleatórios (na verdade simplesmente um conjunto de números produzidos aleatória e uniformemente entre zero e um) são usados a cada interação para determinar qual processo (absorção, fissão, espalhamento elástico, etc.) ocorre, quanta energia é perdida, qual a nova direção da partícula e, se a reação é de fissão, quantos nêutrons são criados. A história da vida de uma partícula começa com o nascimento a partir de uma fissão ou de uma fonte externa e termina com sua absorção ou fuga do sistema. Os eventos que ocorrem durante a vida da partícula são tabelados e tais registros tornam-se a história daquela partícula. Como uma única partícula não é representativa do sistema por inteiro um grande número de histórias deve ser avaliado para descrever apropriadamente o que ocorre no sistema. Todos os resultados obtidos representam estimativas dos valores médios das variáveis aliados às incertezas associadas.

A seguir tem-se um histórico do método Monte Carlo discorrendo sobre as características e diferenças deste para os métodos determinísticos. Também é apresentada uma breve descrição do método e sua aplicação na estimativa dos dois parâmetros fundamentais da análise neutrônica de reatores, o fator de multiplicação de nêutrons e o fluxo de nêutrons.

#### 2.4.1 Histórico e Características Gerais de Monte Carlo

O uso de amostragens aleatórias para resolver problemas matemáticos parece ter sido documentado pela primeira vez pelo Conde de Buffon em 1772 (BRIESMEISTER, 1997). Em 1786 Laplace sugeriu que o número  $\pi$  (pi) podia ser avaliado por amostragem aleatória. Kelvin parece ter usado amostragem aleatória para avaliar integrais que aparecem na teoria cinética dos gases. Contudo, a despeito de suas raízes remontarem a séculos atrás, o grande impulso no desenvolvimento do método Monte Carlo deve-se a estudos para solucionar problemas de transporte de partículas creditados a Fermi, Ulam, von Neumann e Metropolis para o Projeto Manhattan, em Los Alamos, durante a segunda guerra mundial. No final da década de 1940 e início da década de 1950 surgiram trabalhos descrevendo o método Monte Carlo e sua aplicação para resolver problemas de transporte de partículas e radiação. KAHN (1954) publicou o primeiro relatório detalhado sobre o método Monte Carlo e CASHWELL e EVERETT (1959) publicaram o primeiro livro. Outros livros se seguiram, SPANIER e GELBARD (1969) e LUX e KOBLINGER (1990). O nome do método matemático, Monte Carlo, é creditado a Nicholas Metropolis e refere-se à cidade européia de mesmo nome, famosa pelos seus cassinos e jogos de azar como por exemplo a roleta, a qual, em última análise é um gerador de números aleatórios.

Monte Carlo atualmente encontra aplicações diversas como por exemplo estudos sobre o fluxo de veículos no trânsito, econometria, evolução estelar e exploração de poços de petróleo. Porém, sua maior aplicação continua sendo a análise das interações das radiações com a matéria, ou seja, a análise dos fenômenos de transporte de partículas. Neste campo as aplicações vão da análise de segurança quanto à criticalidade em sistemas contendo material físsil a estudos de dosimetria para tratamento de câncer e ainda, projeto de reatores nucleares e de aceleradores de partículas, blindagem das radiações e outros. A grande desvantagem do método Monte Carlo reside nas milhares ou milhões de simulações

necessárias para obter resultados precisos, uma vez que, a toda estatística existe um erro associado ao valor médio, a variância. Para reduzir este erro estatístico a valores aceitáveis e obter resultados práticos satisfatórios um grande número de simulações deve ser feito o que demanda grande poder de computação e, conseqüentemente, cálculos bastante demorados.

Essa necessidade de poderosos recursos computacionais para viabilizar Monte Carlo em aplicações práticas limitava até recentemente a utilização do método. A disponibilidade de microcomputadores de baixo custo e alto desempenho verificada nesse início de século tem impulsionado fortemente aplicações de Monte Carlo na área nuclear. Nas últimas cinco décadas a teoria de difusão de nêutrons tem sido a ferramenta básica para análise de reatores nucleares. Ela funciona bem para a maioria dos reatores, entretanto não produz resultados precisos em problemas que incluam fortes absorvedores de nêutrons ou vazios. Ela exige inúmeras simplificações nas equações e no tratamento das seções de choque o que resulta em um grande esforço para validação da metodologia de cálculo. Além disto, os códigos que usam a teoria de difusão têm fortes limitações na representação geométrica do problema (geralmente só trabalham com retângulos, cilindros, esferas e hexágonos). Por outro lado, os códigos de Monte Carlo permitem o modelamento exato de todos os detalhes geométricos e sem a necessidade de homogeneização espacial e energética das seções de choque.

O método Monte Carlo é muito diferente dos métodos de transporte determinísticos. Monte Carlo não resolve uma equação explícita, mas, obtém respostas pela simulação das partículas individuais e vai gravando as características de interesse do comportamento médio destas partículas (a estas características de interesse chamaremos *registros* ou *tallies*). O comportamento médio de todas as partículas do sistema físico é então inferido do comportamento médio das partículas simuladas. Não somente o método Monte Carlo e os métodos determinísticos são formas muito diferentes de resolver um problema como até mesmo o que constitui a solução é diferente. Métodos determinísticos geralmente dão informações razoavelmente completas em todo o domínio espacial do problema. Monte Carlo, por outro lado, fornece informação somente sobre as características específicas ("tallies") solicitadas pelo usuário.

#### CAPÍTULO 2 – REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nesse contexto, deve-se entender que Monte Carlo resolve um problema de transporte simulando as histórias de vida das partículas e não propriamente resolvendo a equação que descreve o problema. Nenhuma equação de transporte precisa ser escrita para resolver um problema de transporte por Monte Carlo. Contudo, é necessário uma equação que descreva a Densidade de Probabilidade das partículas no espaço e esta equação torna a ser, muitas vezes, a própria equação de transporte integral. Os métodos numéricos (volumes, diferenças e elementos finitos) assumem o espaço dividido em muitas pequenas caixas e as partículas movendo-se de uma caixa para outra. No limite, quando as caixas tornam-se progressivamente menores, partículas movendo-se de caixa em caixa gastam uma quantidade diferencial de tempo para mover uma distância diferencial no espaço. Desse modo, no limite obtém-se a famosa equação de transporte de nêutrons, uma equação íntegro-diferencial, a qual tem derivadas no espaço e tempo. Por outro lado, Monte Carlo transporta partículas entre eventos (colisões, capturas, fissões e fugas) que são separados no espaço e tempo. Diferenciais de tempo e/ou espaço não são parâmetros inerentes ao transporte por Monte Carlo e, portanto, a equação integral a ser resolvida não tem derivadas de tempo nem de espaço.

Por Monte Carlo não usar o conceito de caixas no espaço não existem as aproximações requeridas para o espaço, energia e tempo encontradas nas simulações por métodos numéricos. Isto é especialmente importante porque permite a representação detalhada de todos os aspectos das interações entre as partículas e dos dados físicos, o que leva a uma simulação muito mais precisa e possibilita reduzir o esforço de validação da metodologia de cálculo e dos dados.

#### 2.4.2 Introdução ao Método de Transporte por Monte Carlo

Todas as aplicações do método Monte Carlo baseiam-se na construção de um modelo probabilístico para descrever um fenômeno e/ou sistema no qual o valor esperado de uma, ou mais, variável aleatória é equivalente ao valor da grandeza física de interesse. Esse valor esperado é então estimado pela média de várias amostras independentes representando a dita variável aleatória. Para construir essas séries de amostras independentes, números aleatórios que obedecem às Distribuições de Probabilidade da
variável de interesse a ser estimada são utilizados. Portanto, a habilidade para selecionar os números aleatórios apropriados é fundamental.

O método Monte Carlo pode ser definido como um método de simulação estatística que utiliza seqüências de números aleatórios para estimar a solução de um problema físico. Os passos necessários para essa simulação incluem:

- As Funções de Distribuição de Probabilidade equações que descrevem o sistema físico a ser simulado.
- ii. Geração dos números aleatórios uma fonte de números aleatórios uniformemente distribuídos no intervalo [0,1].
- iii. Geração das variáveis aleatórias métodos para, a partir das distribuições de probabilidade, se obter os valores das variáveis aleatórias, as quais, são em última instância as grandezas físicas de interesse.
- iv. Estimação dos resultados os resultados devem ser determinados e acumulados nos registradores apropriados para as grandezas de interesse.
- v. Avaliação dos erros uma estimativa dos erros estatísticos (variância) em função do número de tentativas (ou histórias).
- vi. Técnicas para redução da variância para reduzir o tempo computacional ou, em alguns casos, até mesmo possibilitar a simulação.
- vii. Paralelização e Vetorização algoritmos para permitir implementar o método de maneira eficiente nos computadores.

Cada um destes itens será discutido a seguir (exceto os itens vi e vii que se referem a técnicas computacionais e não ao método matemático em si e, portanto, fogem ao escopo dessa breve introdução ao método). Essa discussão busca apenas apresentar conceitos básicos do método. A descrição com detalhes exaustivos (e bastante "áridos") de técnicas específicas do método Monte Carlo podem ser encontradas em CASHWELL e EVERETT (1959), SPANIER e GELBARD (1969), LUX e KOBLINGER (1990) e AYYUB e MCCUEN (1997).

2.4.2.1 Probabilidade das variáveis aleatórias contínuas

Define-se a probabilidade da variável aleatória X ser igual ao valor  $x_0$  por,

$$P(X = x_0) = \frac{n}{N} \tag{2.1}$$

onde n = número de observações da variável aleatória X que resultam no valor  $x_0$  e N = número total de observações de X.

A variável é dita contínua se ela pode assumir qualquer valor dentro de um intervalo. Na teoria geral das variáveis aleatórias esse intervalo é, em geral, considerado como  $[-\infty, +\infty]$ . Entretanto, para simplificar os procedimentos (e o entendimento), neste texto assumiremos sempre o intervalo dos números aleatórios [0, 1] a fim de reduzir o número de equações que aparecem no texto.

O próximo passo é a introdução de dois conceitos fundamentais na teoria das probabilidades. A *função densidade de probabilidade* (pdf), que define a probabilidade de ocorrência da variável aleatória e, a *função distribuição de probabilidade* que é a probabilidade da variável aleatória X estar dentro de determinado intervalo. Estes conceitos se relacionam de modo que a distribuição de probabilidade pode ser entendida como a integral da densidade de probabilidade sobre o intervalo de interesse, ou seja,

$$P(0 \le X \le 1) = \int_{0}^{1} f_X(x) \, dx \tag{2.2}$$

sendo o termo à esquerda na equação a distribuição de probabilidade e  $f_X(x)$  a pdf. O caso particular da função distribuição de probabilidade tal que  $P(X \le x_0)$  é chamado Função de Distribuição Acumulada (cdf) definida por,

$$F_X(x_0) = P(X \le x_0) = \int_0^{x_0} f_X(x) dx$$
(2.3)

Obviamente, a relação entre a cdf e a pdf pode ser também expressa por,

$$f_X(x) = \frac{dF_X(x)}{dx}$$
(2.4)

A fim de ilustrar a aplicação da metodologia de Monte Carlo será usado como exemplo o cálculo das distâncias percorridas entre as colisões das partículas com os átomos que compõem um meio homogêneo (neste texto essas distâncias entre colisões serão também chamadas de comprimentos de trechos ou ainda percurso livre. A trajetória da partícula poderá então ser constituída de vários comprimentos de trechos). A determinação dessas distâncias entre colisões constitui um exemplo simples e que, por isto mesmo, facilita muito o entendimento do método. A despeito de sua simplicidade a estimação das distâncias entre colisões permite determinar outras quantidades de interesse como o fluxo de nêutrons ou a multiplicação neutrônica (criticalidade), como será visto mais adiante.

A função densidade de probabilidade para partículas colidindo com os átomos do meio material é dada por,

$$p(x) = \sum_{t} e^{-\sum_{t} x}$$
(2.5)

onde  $\Sigma_t$  é seção de choque macroscópica total do meio.

Dito isto, pode-se encerrar essa curta apresentação sobre distribuições de probabilidades. Seguindo a seqüência, já mencionada, de passos necessários para a simulação por método Monte Carlo a discussão a seguir refere-se à geração de números aleatórios.

## 2.4.2.2 Geração de números aleatórios

Números aleatórios são valores reais. Existem duas maneiras para se obter as séries de números aleatórios. A primeira baseia-se em fenômenos fisicos aleatórios como ruído eletrônico, jogadas de dados ou mesmo fazer girar uma roda com uma escala. A segunda, utiliza algoritmos computacionais que fornecem os números aleatórios a partir de uma fórmula matemática. Alguns autores chamam as séries de números aleatórios geradas por algoritmos aritméticos de *pseudoaleatórios*. Desde que satisfaçam aos testes de aleatoriedade, do mesmo modo que os números aleatórios gerados fisicamente, esses números pseudoaleatórios podem ser utilizados nas simulações e na prática o seu uso é quase uma unanimidade. Existem diversos algoritmos e fórmulas geradoras de números pseudoaleatórios e a seguir será descrito o gerador usado no programa MCNP, o qual, emprega o esquema equivalente linear de Lehmer (BRIESMEISTER, 1997).

A fórmula geradora de números aleatórios inteiros do esquema de Lehmer é

. .

$$I_{n+1} = GI_n + C \mod 2^M$$
,  $n = 0, 1, 2, ...$  (2.6)

ou seja, o resto da divisão de  $GI_n + C$  por  $2^M$ . Assim, o número aleatório no intervalo [0,1] será

$$R_n = \frac{I_n}{2^M} \tag{2.7}$$

sendo,

 $G = 5^{19} = 19.073.486.328.125$ 

M = 48

- $\mathbf{C} = \mathbf{0}$
- $I_0 = 1$

Estes, são os valores "default" do MCNP para os parâmetros acima, os quais, podem ser alterados pelo usuário caso necessário. Para estes valores dos parâmetros da fórmula geradora, o período do algoritmo, isto é, a quantidade de diferentes números aleatórios gerados até que comecem a repetir os valores atinge  $2^{46} \approx 7,04 \times 10^{13}$ . Se necessário pode-se ampliar o período para até  $2^{63} \approx 9,2 \times 10^{18}$  mudando os valores de G, M e C. Os resultados podem ser influenciados pela precisão (número de casas decimais) tornando-os dependentes da plataforma computacional utilizada. O algoritmo usado no MCNP adota alguns artifícios para permitir a portabilidade entre diferentes plataformas. A tabela 2.3 mostra os cinco primeiros números aleatórios gerados utilizando o esquema descrito.

n	$I_n$	$R_n$
0	1	3,5527E-15
1	1,9073E13	0,0678
2	2,9756E13	0,1057
3	1,4383E14	0,5110
4	2,7653E14	0,9824

Tabela 2.3 - Cinco primeiros números aleatórios gerados.

# 2.4.2.3 Geração de variáveis aleatórias

Agora será discutido o terceiro passo rumo a uma simulação por Monte Carlo. Como determinar uma variável aleatória, x, (ou ainda a grandeza física de interesse) a partir de uma pdf, f(x). Neste texto apenas o método da *transformação inversa* será apresentado. Contudo, como a inversão nem sempre é possível, existem outros métodos de transformação das pdf que podem ser utilizados para geração de variáveis aleatórias (SPANIER e GELBARD, 1969; LUX e KOBLINGER, 1990; AYYUB e MCCUEN, 1997).

Este método é simples e direto. Considerando o intervalo [0, 1], a cdf, F(x), definida pela equação 2.3 é tal que,

$$F(x) = \int_{0}^{x} f(x) dx = \xi$$
 (2.8)

onde  $\xi$  é um número aleatório qualquer entre 0 e 1. Desta equação segue que,

$$F(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\xi} \implies \mathbf{x} = F^{-1}(\boldsymbol{\xi})$$
,

mostrando que a variável aleatória, x, pode ser obtida pela simples inversão da cdf.

Freqüentemente a solução exata da equação 2.8 é muito complicada ou até mesmo impossível devido à complexidade da pdf. Nesses casos pode-se empregar aproximações ou simplificações da pdf, soluções iterativas da equação ou ainda a solução comumente preferida que é a utilização de um método diferente para transformação de pdf e geração de variáveis aleatórias que não o método da transformada inversa. Também, em alguns casos é possível selecionar alguns valores "convenientes" de x, os quais, facilitam a solução da equação 2.8.

Uma vez apresentado o método da transformação inversa segue um exemplo de sua aplicação. Introduzindo a função densidade de probabilidade para as colisões das partículas com os átomos no meio homogêneo, dada pela equação 2.5, na equação 2.8 temse,

$$F(x) = \int_{0}^{x} \Sigma_{t} e^{-\Sigma_{t} x} dx = \xi \qquad \Rightarrow \qquad \int_{0}^{x} \Sigma_{t} e^{-\Sigma_{t} x} dx = \xi$$

esta integral pode ser facilmente resolvida fazendo a substituição de variáveis,

$$u = -\Sigma_t x$$
;  $du = -\Sigma_t dx$ 

Substituindo na equação, vem que,

$$\int_{0}^{u} -e^{u} du = \xi \qquad \Rightarrow \qquad -e^{u} \Big|_{0}^{u} = \xi \qquad \Rightarrow \qquad -(e^{-\Sigma_{t} x} - 1) = \xi \qquad \Rightarrow$$
$$-\Sigma_{t} x = \ln(1 - \xi) \qquad \Rightarrow \qquad x = -\frac{1}{\Sigma_{t}} \ln(1 - \xi)$$

Observando que  $(1 - \xi)$ , do mesmo modo que  $\xi$ , será sempre um número aleatório no intervalo [0, 1], pode-se enfim escrever a equação que relaciona a variável aleatória, x, (cujo sentido físico é a distância entre as colisões das partículas com os átomos do meio) com um número aleatório,  $\xi$ , por,

$$x = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln \xi \tag{2.9}$$

# 2.4.2.4 Estimação dos resultados

Os resultados de análises estatísticas, portanto, os resultados de uma simulação por Monte Carlo, são expressos em termos de valores médios. O *valor médio* de uma variável aleatória contínua é definido por,

$$\overline{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x) dx$$
(2.10)

Na prática como a variável aleatória é estimada utilizando um número finito de números aleatórios (ou amostras, ou ainda, histórias) a equação 2.10 é geralmente computada como um somatório que, para o caso de se atribuir pesos iguais a cada amostra torna-se,

$$\overline{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} x_i$$

onde,  $n \in o$  número de amostras simuladas.

Voltando ao exemplo pode-se agora estimar a distância média entre as colisões das partículas com os átomos no meio homogêneo. Introduzindo a equação 2.5 em 2.10 e, lembrando que a variável x (distância entre colisões) só é definida em  $[0, +\infty]$ , tem-se que,

$$\overline{x} = \int_{0}^{\infty} x \Sigma_{t} e^{-\Sigma_{t} x} dx \qquad \Rightarrow \qquad \overline{x} = \Sigma_{t} \left( \frac{-\Sigma_{t} x - 1}{\left(-\Sigma_{t}\right)^{2}} e^{-\Sigma_{t} x} \right) \Big|_{0}^{+\infty} \qquad \Rightarrow$$

$$\overline{x} = \frac{1}{\Sigma_{t}} \qquad (2.11)$$

Relembrando da teoria de transporte de nêutrons percebe-se que a equação 2.11, a qual fornece a distância média entre as colisões das partículas com os átomos do meio, é a bem conhecida fórmula do *livre percurso médio* dos nêutrons.

# 2.4.2.5 Avaliação dos erros

Apenas o valor médio não é suficiente para caracterizar completamente uma variável aleatória. É preciso quantificar a incerteza associada ao resultado obtido. Essa incerteza é estimada pela *variância*, entretanto, geralmente é mais utilizada a raiz quadrada da variância, chamada *desvio padrão*. A variância de uma variável aleatória contínua é definida por,

$$\sigma^{2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - \bar{x})^{2} f(x) \, dx \tag{2.12}$$

Do mesmo modo que a média, a variância, na prática também é computada como um somatório, portanto,

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \overline{x})^2$$

A variância do exemplo adotado será então,

$$\sigma^{2} = \int_{0}^{+\infty} (x - \overline{x})^{2} f(x) dx = \int_{0}^{+\infty} (x - \frac{1}{\Sigma_{t}})^{2} \Sigma_{t} e^{-\Sigma_{t} x} dx \qquad \Rightarrow$$
$$\sigma^{2} = \Sigma_{t} \left[ \left( \int_{0}^{+\infty} x^{2} e^{-\Sigma_{t} x} dx \right) - \left( \int_{0}^{+\infty} \frac{2x}{\Sigma_{t}} e^{-\Sigma_{t} x} dx \right) + \left( \int_{0}^{+\infty} \frac{1}{\Sigma_{t}^{2}} e^{-\Sigma_{t} x} dx \right) \right] \qquad \Rightarrow$$

$$\sigma^{2} = \Sigma_{t} \left[ -\left( \frac{(\Sigma_{t}^{2} x^{2} + 2\Sigma_{t} x + 2) e^{-\Sigma_{t} x}}{\Sigma_{t}^{3}} \right) + \left( \frac{2(\Sigma_{t} x + 1) e^{-\Sigma_{t} x}}{\Sigma_{t}^{3}} \right) - \left( \frac{e^{-\Sigma_{t} x}}{\Sigma_{t}^{3}} \right) \right] \Big|_{0}^{+\infty} \Rightarrow$$

$$\sigma^{2} = \frac{e^{-\Sigma_{t} x}}{\Sigma_{t}^{2}} \left[ -\left( \Sigma_{t}^{2} x^{2} + 2\Sigma_{t} x + 2 \right) + \left( 2(\Sigma_{t} x + 1) \right) - (1) \right] \Big|_{0}^{+\infty} \Rightarrow \sigma^{2} = -\frac{e^{-\Sigma_{t} x}}{\Sigma_{t}^{2}} \left[ \Sigma_{t}^{2} x^{2} + 1 \right] \Big|_{0}^{+\infty} \Rightarrow$$

$$\sigma^{2} = \frac{1}{\Sigma_{t}^{2}} \qquad (2.13)$$

#### 2.4.3 A Estimativa do Fluxo de Nêutrons por Monte Carlo

A determinação da distribuição do fluxo de nêutrons, juntamente com o valor do fator de multiplicação de nêutrons efetivo, consistem no objetivo central da análise neutrônica de reatores. Assim, esta seção introduzirá os conceitos utilizados pelo método Monte Carlo para calcular o fluxo de nêutrons. Do mesmo modo a seção 2.4.4 será dedicada à determinação do fator de multiplicação de nêutrons.

O fluxo de nêutrons ou fluxo neutrônico é uma grandeza física de determinação bastante complexa. Com dependências espacial (no plano cartesiano, tem coordenadas x,y,z), direcional (ângulos  $\alpha \in \beta$ ), temporal e energética, percebe-se que a sua determinação pode envolver até sete variáveis independentes. Contudo, como será visto adiante Monte Carlo estima o valor do fluxo neutrônico simplesmente somando as distâncias percorridas entre as colisões dos nêutrons. Define-se, então, o fluxo neutrônico como o produto da densidade de nêutrons pela sua velocidade, ou seja,

$$\psi(\vec{r},\hat{\Omega},E,t) = v \eta(\vec{r},\hat{\Omega},E,t)$$

onde,  $\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ , o fluxo angular, é uma função do vetor posição da partícula,  $\vec{r}$ ; do vetor direção,  $\hat{\Omega}$ ; da energia, E; e do tempo, t. v é a velocidade da partícula e,  $\eta(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$  é a densidade angular de nêutrons (número de nêutrons, W, dividido pelo volume, V; pela energia, E; pelo ângulo sólido,  $\Omega$ , e pelo tempo, t).

Assim, para obter o fluxo escalar total é necessário integrá-lo em todas as suas variáveis independentes. Na prática existem diferentes maneiras de estimar o fluxo por Monte Carlo. A seguir será descrito apenas a estimação do fluxo neutrônico em um volume

qualquer de interesse. Outros modos para estimação do fluxo podem ser encontrados em LUX e KOBLINGER (1990). O fluxo neutrônico total por unidade de volume,  $\phi_{\nu}$ , é expresso por

$$\phi_{V} = \frac{1}{V} \int_{E} dE \int_{t} dt \int_{V} dV \int_{\Omega} d\Omega \ \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) = \frac{1}{V} \int_{E} dE \int_{t} dt \int_{V} dV \int_{\Omega} d\Omega \ v \ \eta(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$$

como  $v = dx/dt \Rightarrow dx = vdt$ , substituindo na equação acima, vem,

$$\phi_{\nu} = \frac{1}{V} \int_{E} dE \int_{V} dV \int_{\Omega} d\Omega \int_{x} dx \ \eta(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) = \frac{1}{V} EV \Omega x \frac{W}{EV\Omega} = \frac{1}{V} W x$$

$$\phi_{\nu} = \frac{W x}{V}$$
(2.14)

O desenvolvimento acima, um pouco matematicamente grosseiro, é apenas para mostrar que as integrais acima, e conseqüentemente o fluxo médio total em um volume, podem ser estimadas como um somatório  $\frac{Wx}{V}$  dos livre percursos entre as colisões das partículas com trajetória no volume considerado. A dependência energética e temporal do fluxo é levada em conta agrupando as distâncias entre colisões, x, em grupos apropriados de energia e tempo. A dependência direcional pode ser desconsiderada pois o fluxo é totalizado em todo o ângulo sólido. Por razões óbvias este método é conhecido como estimativa do fluxo pelo comprimento dos percursos (tradução livre do inglês *track length estimation*).

# 2.4.4 A Estimativa do Fator de Multiplicação de Nêutrons por Monte Carlo

Em sistemas que apresentam materiais físseis, como nos reatores nucleares, a determinação do fator de multiplicação de nêutrons efetivo,  $k_{eff}$ , é crucial. Em tais cálculos, quando se utiliza Monte Carlo, um grupo de histórias de nêutrons é chamado *ciclo*. Os ciclos são o equivalente às gerações de nêutrons da teoria de reatores. O fator de multiplicação do sistema é dado pela razão entre o número de nêutrons gerados no ciclo (aqueles criados nas fissões que ocorrerem no ciclo) e o número de histórias de nêutrons avaliadas no ciclo (o número de nêutrons da fonte definida pelo usuário). Do mesmo modo,

se avaliam as fugas de nêutrons e capturas. Simulando muitos ciclos (cada qual contendo várias histórias) obtém-se o valor do fator de multiplicação médio do sistema, dado por,

$$\overline{k} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} k_{i}$$

sendo  $\overline{k} = k_{eff}$  médio do sistema; n = número de ciclos ativos; e  $k_i = k_{eff}$  de cada ciclo.

Intuitivamente, pode-se perceber que o número de reações neutrônicas que ocorrem em um material é o produto do número de nêutrons pelo número de átomos no material multiplicado pela seção de choque correspondente à reação de interesse. Este importante parâmetro da teoria de reatores chamado *taxa de reação*, *R*, em um dado volume é expresso matematicamente por,

$$R = \phi \rho_a \sigma = \phi \Sigma \tag{2.15}$$

sendo  $\phi$  = fluxo de nêutrons,  $\rho_a$  = densidade atômica do material (número de átomos dividido pelo volume) e  $\sigma$  = seção de choque microscópica. Não estão representados na equação 2.15 as dependências do fluxo neutrônico a fim de apresentar a equação das taxas de reações da maneira mais simples possível. A equação 2.15 explicita finalmente a seção de choque macroscópica,  $\Sigma$ , já bastante mencionada neste texto, como o produto da seção de choque microscópica pela densidade atômica.

Finalmente, é também bastante intuitivo que o número de nêutrons produzido em um material multiplicador consiste na taxa de reações de fissão multiplicada pelo número médio de nêutrons criado em cada fissão,  $\overline{v}$ , portanto, o número de nêutrons, *k*, produzidos a cada segundo, por volume de material fissil, será,

$$k = \phi \rho_a \sigma_f \overline{\nu} \tag{2.16}$$

Analogamente à determinação do fluxo de nêutrons existem diferentes maneiras de estimar o  $k_{eff}$  de cada ciclo pelo método Monte Carlo e novamente, por coerência, este texto descreverá a estimação pelo comprimento dos trechos/percursos das trajetórias dos nêutrons. Outros modos para estimar o fator de multiplicação também podem ser encontrados em LUX e KOBLINGER (1990). A estimativa do  $k_{eff}$  é acumulada no registrador apropriado toda vez que um nêutron atravessa um percurso x no material multiplicador. O estimador por comprimento de percurso para cada ciclo será,

$$k_i = \frac{1}{N} \sum_j W_j \ x \ \rho_a \sum_m f_m \ \sigma_{f_m} \overline{\nu}_m \tag{2.17}$$

sendo, N = total de histórias de nêutrons do ciclo;  $W_j =$  número de nêutrons na trajetória j; x = comprimento da trajetória do nêutron;  $f_m =$  fração atômica do nuclídeo m;  $\sigma_{f_m} =$  seção de choque microscópica de fissão do nuclídeo m;  $\overline{v_m} =$  número médio de nêutrons criados por fissão em nuclídeo m, na energia do nêutron incidente; j é o somatório para todas as trajetórias; e m é o somatório para todos os nuclídeos que formam o material multiplicador.

Nota-se a analogia entre as equações 2.16 e 2.17. O somatório em m (na equação 2.17) surge uma vez que o material multiplicador pode apresentar vários nuclídeos fissionáveis.

# 2.4.5 Sumário do Transporte de Partículas por Monte Carlo

No desenrolar da seção 2.4 procurou-se apresentar conceitos básicos do método Monte Carlo e como aplicá-lo na análise do movimento aleatório de partículas, notadamente nêutrons, através de um sistema físico contendo material físsil. Cabe agora, finalmente, um rápido sumário que aglutine os conceitos da abordagem por Monte Carlo da análise de reatores. O processo se inicia pela geração de uma seqüência de números aleatórios entre 0 e 1 que são utilizados para produzir uma distribuição aleatória das grandezas presentes no problema. Depois disso segue então:

1) A determinação da posição inicial dos nêutrons da fonte.

 Seleção da energia inicial do nêutron através de um número aleatório (usando a fórmula matemática que relaciona a distribuição de energia dos nêutrons de fissão com um número aleatório).

 Seleção da direção do nêutron (usa o próximo número aleatório da seqüência para determinar o ângulo da trajetória inicial).

 Seleção da posição onde ocorre a primeira interação do nêutron (equação 2.9 fornece a distância percorrida).

5) Verificação da nova posição para ver se a partícula escapou do sistema. Se fugiu, adicione um ao registrador de fugas, volte ao passo 1 e inicie a próxima história com

outro nêutron. Se não fugiu, acumule os valores de interesse nos registradores apropriados e,

6) Selecione o tipo de interação ocorrida (próximo número aleatório).

7) Se a interação for espalhamento, selecione a nova energia do nêutron usando o próximo número aleatório. Volte ao passo 3 e continue seguindo o nêutron. Se a interação for captura, acumule os valores de interesse nos registradores apropriados, volte ao passo 1 e inicie a próxima história com outro nêutron. Se for fissão, determine quantos nêutrons foram criados e acumule nos registradores.

Quando todas as histórias de um ciclo tiverem sido seguidas calcule as grandezas desejadas a partir dos valores acumulados nos registradores e inicie o novo ciclo repetindo o processo para quantos ciclos forem necessários até obter uma estatística satisfatória.

Todos os textos consultados que tratam do transporte de partículas por Monte Carlo, sem exceção, são extremamente áridos e matematicamente complexos. O objetivo desta introdução aos conceitos do método foi o de tentar apresentá-lo de uma maneira mais simples, didática e com um mínimo de equações a fim de tornar seus fundamentos compreensíveis aos não especialistas.

# 2.5 O Acoplamento da Análise Neutrônica por Monte Carlo à Análise de Queima do Combustível Nuclear

O crescente interesse e utilização de códigos de transporte por Monte Carlo para simulação de reatores nucleares levou ao desenvolvimento de vários códigos ou combinações de códigos que acoplassem a análise de depleção (ou de queima ou ainda, de evolução) do combustível nuclear à análise neutrônica por Monte Carlo. Até recentemente os sistemas de códigos de queima utilizavam a teoria de difusão na parte neutrônica, pois, a pesada demanda computacional inviabilizava na prática o uso de Monte Carlo.

Esse acoplamento entre cálculos de transporte de nêutrons por Monte Carlo e análise de queima é recente, vem sendo chamado de *análise de queima por Monte Carlo (Monte Carlo Burnup*), e permite obter resultados de queima mais precisos, principalmente devido às vantagens do uso de seções de choque ponto a ponto e ao refinamento geométrico. Atualmente existem códigos que realizam esse acoplamento de forma

#### CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

automática e com um mínimo de intervenção do usuário e outros que demandam a intervenção do usuário em cada etapa. As combinações possíveis são muitas, entretanto, na prática a maioria dos sistemas disponíveis acoplam códigos de transporte já bem estabelecidos como o MCNP ou KENO aos de depleção como o ORIGEN. Há aqueles que resolvem o problema da queima apenas para células unitárias ou elementos combustíveis, enquanto que outros o resolvem também para o núcleo inteiro do reator. Alguns sistemas estão disponíveis para a comunidade internacional, enquanto que outros são usados exclusivamente pelas instituições que os desenvolveram. A seguir um levantamento desses sistemas.

Em 1988, MORIMOTO et al (1988) publicaram resultados de cálculos feitos com o código VMONT. Este código vem sendo desenvolvido no Japão e as informações sobre ele são escassas. Sabe-se que é um código para análise de elemento combustível que acopla o cálculo de transporte de nêutrons com o cálculo de queima. Utiliza dados multigrupo, o que elimina uma das principais vantagens de Monte Carlo. Até julho de 2004 o código não estava disponível para a comunidade científica internacional através dos principais distribuidores de códigos nucleares, o RSICC (Radiation Safety Information Computational Center) e o NEA (Nuclear Energy Agency).

HAMID e KLEIN (1994) realizaram modificações no código MCNP permitindo a essa versão modificada, à qual chamaram MCNPBURN, realizar cálculos de queima. Uma rotina para cálculo de depleção foi adicionada ao MCNP para calcular os efeitos da queima sobre as concentrações isotópicas. O código vem sendo utilizado em análises teóricas de sistemas nucleares para aplicações espaciais conduzidos na Universidade Estadual do Oregon, EUA. Este encontra-se indisponível até o momento.

O Laboratório de Engenharia Nacional em Idaho (INEEL) tem desenvolvido e utilizado, desde 1995, o conjunto de utilitários MOCUP (MOORE, 1995) o qual acopla MCNP e ORIGEN2. MCNP realiza o cálculo neutrônico e ORIGEN2 o de depleção. Ele permite modificar a composição isotópica, em função do tempo de irradiação, nas células do MCNP selecionadas pelo usuário. MOCUP consiste de três utilitários (ou módulos). O primeiro, busca as informações relevantes sobre as células, materiais e taxas de reações no arquivo de saída do MCNP. O segundo, prepara o arquivo de entrada de dados para o ORIGEN e o executa, enquanto que o terceiro utilitário faz a busca no arquivo de saída do

ORIGEN das novas composições isotópicas e prepara o novo input para o MCNP. A principal limitação do programa reside na ausência de uma ferramenta que permita a execução automática e serial dos três módulos, o que acaba obrigando o usuário a intervir para executar cada módulo. O código pode ser adquirido junto ao RSICC ou NEA.

NAITO et al (1996) trabalham com MKENO-BURN, uma modificação do código 3D para transporte de nêutrons por Monte Carlo MULTI-KENO, ao qual, foi acoplada a rotina para cálculo de queima do código UNITBURN. MKENO-BURN analisa a queima nas regiões de interesse depois de obter o espectro neutrônico com MULTI-KENO. Foi desenvolvido no JAERI (Japan Atomic Energy Research Institute) e atualmente não está disponível para uso de terceiros.

KLOOSTERMAN et al (1996) descrevem o sistema OCTOPUS desenvolvido no ECN (Netherlands Energy Research Foundation). Este sistema trabalha com SCALE, WIMS7 e MCNP na parte neutrônica acoplados a FISPACT e ORIGEN-S na parte de queima e ativação. Todo o sistema utiliza dados básicos da JEF2.2 e não é disponibilizado para terceiros.

HANAN et al (1998, 2002<sup>b</sup>) desenvolveram um acoplamento entre MCNP e o código de queima REBUS chamado MC-REBUS. Desde 1998 o ANL (Argonne National Laboratory) vem usando este código na análise de reatores e combustíveis nucleares, principalmente para o programa RERTR (Reduced Enrichment for Research and Test Reactors). O código não é disponibilizado para terceiros.

Em 1999 o RSICC começou a distribuir o código MONTEBURNS (POSTON e TRELLUE, 1999). O código é uma ferramenta inteiramente automatizada que acopla o código de transporte por Monte Carlo MCNP com o código de queima e decaimento radioativo ORIGEN2.1. A principal função de MONTEBURNS é transferir seções de choque a um grupo de energia e valores de fluxo de nêutrons do MCNP para o ORIGEN e então transferir as composições isotópicas resultantes após a irradiação (e/ou decaimento) do ORIGEN de volta para MCNP, de uma forma cíclica e repetitiva. O sistema é capaz de fornecer informação quantitativa sobre o  $k_{eff}$  em função do tempo de irradiação, massa de praticamente qualquer produto de fissão e transurânicos adicionados ou removidos do sistema, atividade dos radionuclídeos, calor de decaimento e radiotoxicidade.

BIBLIOTECA CENTRAL DESENVOLVIMENTO COLEÇÃO

O código MCB (CETNAR et al, 1999) tem sido desenvolvido e é utilizado principalmente na simulação de "Accelerator Driven Systems" (ADS) desde 1999. Ele combina MCNP com o código "Transmutation Trajectory Analysis" (TTA) e é bem adequado para simulações de sistemas para transmutação de rejeito nuclear. Permite simular alimentação contínua de material. O cálculo de queima completo pode ser feito em uma única rodada e requer a preparação de um único "input", na verdade uma pequena modificação no "input" do MCNP. O módulo de queima está sendo integrado com MCNPX objetivando criar uma ferramenta integrada de uso universal para simulações de ADS. Desenvolvido pelo Instituto Real de Tecnologia de Estocolmo, o código é distribuído pelo NEA.

CHANG e RYSKAMP (2000) utilizaram o código MCWO para efetuar análise de queima em varetas de combustível de óxido misto de urânio e plutônio em reatores a água leve. MCWO também consiste em um acoplamento de MCNP com ORIGEN desenvolvido no INEEL, porém, ao contrário do MOCUP, não está disponível para terceiros.

O sistema KENOREST é uma ferramenta para cálculos de queima e reatividade para combustível de reatores a água leve que acopla o código de Monte Carlo KENO-V.a com o código de queima alemão OREST-98 (HESSE et al, 2000). O sistema, totalmente automatizado, foi desenvolvido e é utilizado pelo instituto alemão GRS (Gesellschaft fuer Anlagen und Reaktorsicherheit) e não está disponível para terceiros.

DENG et al (2003) têm trabalhado em um código baseado em MCNP e WIMS. O código MCMG-BURN não é um simples acoplamento dos anteriores. Ele utiliza uma biblioteca multigrupo gerada pelo WIMS no lugar da biblioteca ponto a ponto do MCNP. Métodos multigrupo são também usados para tratar as colisões de nêutrons. Este programa está sendo desenvolvido na China e não está disponível para terceiros.

ORNL (2004) recentemente liberou para distribuição através do RSICC o pacote SCALE5. Este pacote contém uma nova seqüência chamada STARBUCS (Standardized Analisys of Reactivity for Burnup Credit using SCALE) a qual realiza cálculos para sistemas contendo combustível irradiado para fins de análise de criticalidade envolvendo crédito de queima. Na prática, essa seqüência acopla e automatiza o cálculo de criticalidade efetuado com KENO-V.a ou KENO-VI com o cálculo de depleção efetuado com ORIGEN-ARP.

Os parágrafos anteriores listam doze sistemas mencionados na literatura como capazes de efetuar cálculos de queima por Monte Carlo. Destes, apenas quatro, MOCUP, MONTEBURNS, MCB e STARBUCS podem ser adquiridos pela comunidade científica internacional sem grandes restrições (na verdade existem restrições a alguns países submetidos a sanções pelos EUA, como por exemplo, Irã, Iraque, Coréia do Norte e Cuba). Assim, a princípio qualquer dos quatro sistemas poderia ser escolhido para realizar o trabalho proposto. Entretanto, já foi mencionado que MONTEBURNS foi o escolhido. Esta escolha pode ser explicada observando que MCNP é um código de transporte por Monte Carlo para múltiplos propósitos, com total flexibilidade geométrica e que dispõe de bibliotecas de seções de choque ponto a ponto (estas e outras características o tornam o código de Monte Carlo mais amplamente utilizado no mundo atualmente) tornando a sua utilização altamente indicada. KENO, por outro lado, apresenta algumas limitações (a biblioteca é multigrupo e focado somente no cálculo de  $k_{eff}$ ) eliminando, portanto, STARBUCS. MCB utiliza na parte de queima o código TTA, o qual é recente e ainda não conta com ampla utilização na comunidade de analistas de reatores, ao contrário do ORIGEN que está bem estabelecido a longo tempo e é amplamente utilizado e bem validado. Sobram então MOCUP e MONTEBURNS. A escolha recaiu sobre MONTEBURNS graças à sua automatização, que elimina a interferência do usuário na manipulação de dados entre os ciclos de queima e na execução dos módulos e, conseqüentemente, reduz a possibilidade do usuário entrar dados errados.

# **CAPÍTULO 3 – METODOLOGIA**

Os estudos sobre o reator IPR – R1 foram realizados por meio de simulações teóricas em microcomputadores. Os modelos e softwares utilizados têm um campo de aplicações bastante amplo e possibilitam seu uso em simulações dos mais diversos sistemas nucleares e fenômenos de transporte de radiações. A preocupação em trabalhar com tecnologias, modelos e softwares flexíveis e de uso amplo e geral sempre foi uma constante neste trabalho. Este capítulo faz uma breve descrição dos softwares MCNP4B, ORIGEN2.1 e MONTEBURNS1.0, os quais, formam a espinha dorsal da metodologia de simulação do reator. Apresenta os softwares e hardwares usados na implantação de um "cluster" de microcomputadores. Descreve ainda o modelo e hipóteses adotados para a simulação do reator bem como a validação deste modelo. Finalmente, apresenta os detalhes de dois dispositivos para o armazenamento de elementos combustíveis gastos do reator.

## 3.1 Cluster de Microcomputadores

A técnica de computação que faz com que vários microprocessadores trabalhem em paralelo na solução de uma única tarefa é conhecida como computação paralela. Os microprocessadores podem ser dispostos juntos em um único computador (muitas vezes chamado supercomputador) ou separadamente em vários computadores que se comunicam através de uma rede. A vantagem da computação paralela sobre a computação seqüencial, que utiliza um único processador, reside na possibilidade de se obter mais rapidamente a solução do problema.

Historicamente e por décadas, os programadores têm desenvolvido algoritmos, linguagens, sistemas operacionais e programas que utilizam um processador por tarefa e que precisam ser repensados e redesenhados para que a computação paralela se desenvolva e popularize. Atualmente, vários laboratórios, universidades e empresas têm se dedicado a esse trabalho. Como resultado, um número crescente de aplicações tem se beneficiado dessa "paralelização" (HARGROVE et al, 2001).

A principal razão para explorar o processamento paralelo deve-se à possibilidade de redução no tempo de execução dos programas nos computadores e seu emprego em

#### CAPÍTULO 3 - METODOLOGIA

grandes computadores ou supercomputadores é bastante difundido. Entretanto, supercomputadores custam milhões de dólares enquanto que microcomputadores custam atualmente cerca de mil dólares. Pensando nisto, na década passada foi iniciado nos Estados Unidos o projeto de pesquisa Beowulf (HARGROVE et al, 2001) com o objetivo de possibilitar que microcomputadores ligados em rede trabalhassem paralelamente na solução de um problema único. Hoje, essa tecnologia de *computação distribuída* é bem conhecida e utilizada mundo afora e popularmente designada pela palavra *cluster*.

A popularização do sistema operacional gratuito Linux foi um impulso ainda maior na disseminação dessa tecnologia. Este sistema é largamente adotado em "clusters" mundo afora. O Linux é um sistema que apresenta confiabilidade, segurança, performance e estabilidade comprovados, bem como, características de sistema multiusuário e multitarefas. Mas o fator mais importante na sua escolha foi o custo financeiro de aquisição praticamente nulo. Uma vez que a implantação de um sistema de computação distribuída visa obter um sistema de alto desempenho a baixo custo o Linux torna-se a escolha óbvia.

A montagem de um "cluster" requer obviamente hardwares e softwares. O hardware básico se resume ao padrão utilizado em microcomputadores, pois ele nada mais é que um conjunto de microcomputadores conectados em rede. O hardware utilizado para montar o "cluster" com 3 computadores no CDTN constou de:

3 Gabinetes com fonte de 350 Watts;

3 Placas-mãe "off board";

3 Processadores Intel Pentium;

3 Chips de memória DIMM RAM;

3 Discos rígido IDE, ATA 100, 40 GB;

3 Placas de rede Ethernet, 10/100 Mbps;

3 Placas de vídeo, SVGA com 32MB, 4X;

3 Monitores SVGA.

Placas de som e alto-falantes, mouses, teclados, drives para disco de 3.5" e CDs, cabos e conectores de rede. Em resumo, três velhos e obsoletos computadores Pentium.

Quanto aos softwares, foram usados somente softwares livres, a saber: sistema operacional Linux, ferramentas (compiladores Fortran e C, bibliotecas, editores de texto) e PVM – "Parallel Virtual Machine" (GEIST et al, 1994). Segue uma breve descrição desses softwares.

# 3.1.1 Sistema Operacional

Linux é um sistema operacional UNIX criado na Universidade de Helsinki, Finlândia. A primeira versão foi liberada por Linus Torvalds em 1991 e desde então tem sido continuamente desenvolvido por diversos voluntários e empresas uma vez que seu código fonte é aberto. Dentre as várias distribuições Linux disponíveis optou-se pela Conectiva (CONECTIVA, 2000<sup>a</sup>; CONECTIVA, 2000<sup>b</sup>). O Conectiva Linux foi escolhido por ser a Conectiva uma empresa brasileira, o que facilita o suporte técnico além de contar com documentação e interface em português. A versão Conectiva Linux 6.0 foi a primeira utilizada no "cluster" e neste texto todas as informações referem-se a ela.

## 3.1.2 Ferramentas

As distribuições Linux geralmente incluem, também gratuitamente, ferramentas de desenvolvimento como compiladores C e Fortran, editores de texto, planilhas eletrônicas, navegadores para internet, etc. São diversos os aplicativos e ferramentas para Linux que podem ser obtidos facilmente pela internet (www.gnu.org é um bom ponto de partida). Para desenvolver esse trabalho as ferramentas usadas foram principalmente compiladores e suas bibliotecas, necessários para a implantação dos códigos nucleares. Existem compiladores comerciais Fortran e C para Linux, como por exemplo, *Lahey* e *Absoft*, entretanto, foram utilizados os compiladores gratuitos g77 e gcc (GNU, 2001). Estes fazem parte da coleção de compiladores GNU e obedecem ao padrão Fortran77 e ANSI C.

# 3.1.3 PVM - "Parallel Virtual Machine"

O PVM (GEIST et al, 1994) é um software que permite desenvolver e executar programas em um conjunto de computadores unidos por rede como se estes fossem um único computador paralelo. O modelo de *passagem de mensagens* é o paradigma adotado pelo PVM. O conceito-chave do PVM é que ele faz com que os vários computadores apareçam como um único grande computador virtual, daí o nome. O pacote PVM foi projetado para trabalhar com uma rede heterogênea, podendo esta ser constituída por computadores de diferentes fabricantes e/ou modelos (Pentium, Pentium II, III, IV, SUN, HP, etc.), sistemas operacionais (Linux, Solaris,...) e formatos de dados.

## 3.2 Os Códigos Nucleares

Os softwares para simulações de sistemas contendo material nuclear e que permitem calcular os parâmetros de interesse desses sistemas são historicamente chamados códigos nucleares. As metodologias usadas para simulação dos sistemas nucleares, em geral, empregam diversos códigos em que cada um encarrega-se de resolver uma parte do problema. A metodologia de cálculo implementada e utilizada neste trabalho para simular o reator IPR – R1 envolve três códigos distintos. Um código de Monte Carlo, MCNP, para simular o transporte de partículas no sistema; outro, ORIGEN, para calcular a queima e decaimento radioativo do combustível nuclear; e um terceiro código, MONTEBURNS, que acopla e automatiza as interações entre os dois anteriores. A seguir tem-se uma breve descrição sobre cada um dos três. Além destes, também é apresentado o pacote de códigos SCALE, usado para comparar resultados do estudo de opções de armazenamento dos elementos combustíveis gastos do reator.

### 3.2.1 MCNP – Cálculos de Transporte por Monte Carlo

Os cálculos de transporte que descrevem as interações das partículas com a matéria são realizados com o software MCNP. O MCNP (Monte Carlo N-Particle transport code) é um código de propósito geral baseado no método de transporte por Monte Carlo utilizado para simulação estatística do transporte de nêutrons, fótons, elétrons e para estas partículas de forma combinada (nêutron/fóton/elétron, nêutron/fóton, fóton/elétron ou elétron/fóton). Vem sendo continuamente desenvolvido pelo Laboratório Nacional de Los Alamos (LANL), EUA, e sua distribuição é feita através do RSICC. O código é utilizado em inúmeras aplicações como blindagem das radiações, projeto de irradiadores, calibração

da eficiência de detectores de radiação, análise de aceleradores de partículas, física médica (BNCT, PET, radiologia, etc.), projeto de reatores nucleares e análise de criticalidade.

Os primeiros códigos de Monte Carlo, nos quais MCNP tem sua origem, eram escritos em linguagem de máquina e cada código resolvia um problema específico. Na década de 1960, melhores computadores e a padronização de linguagens de programação como o Fortran tornaram possível a elaboração de códigos mais gerais. O primeiro código de propósito geral para cálculos de transporte de partículas por Monte Carlo foi o MCS, escrito em Los Alamos, em 1963. Ele tornou possível a pesquisadores que não eram necessariamente especialistas em computação e técnicas matemáticas de Monte Carlo, utilizá-lo para resolver problemas simples de transporte de radiação, sem ter que eles próprios escreverem o código. MCN substituiu o código anterior em 1965. MCN era capaz de resolver o problema da interação dos nêutrons com a matéria em geometria tridimensional e usava dados de seções de choque, altamente avançadas para a época, armazenados separadamente do programa em bibliotecas de dados. O próximo desenvolvimento ocorreu em 1973 com a fusão entre MCN e MCG, formando o novo código MCNG, que acoplava o tratamento de fótons de alta energia ao transporte de nêutrons. Finalmente, em 1977, o código passa a ser chamado MCNP com o acoplamento entre MCNG e MCP, o qual, tratava detalhadamente a física de fótons de baixas energias, até 1 keV, e possibilitou então modelar interações nêutron-fóton (BRIESMEISTER, 1997).

A primeira versão a ser internacionalmente distribuída pelo RSICC e inteiramente reescrito no padrão ANSI Fortran77 foi o MCNP3, em 1983. Seguiram-se, MCNP3A, em 1986; 3B em 1988; MCNP4, 1990; 4A, 1993; 4B, 1997; 4C, 2000; e MCNP5 em 2003. Este código representa atualmente um trabalho acumulado superior a 500 pessoas-ano. Novas características continuam sendo adicionadas a ele para refletir avanços na ciência da computação, técnicas de Monte Carlo e modelos físicos.

A versão do MCNP utilizada neste trabalho é a 4B, adquirida em 1999. O código permite modelar de forma geral qualquer sistema geométrico tridimensional e possui recursos para visualização da modelagem. Em termos de cálculos ele utiliza bibliotecas de seções de choque na forma contínua (ponto a ponto) ou multigrupo com dados nucleares (nêutrons) e atômicos (fótons e elétrons) oriundos da biblioteca ENDF/B-VI e outras. Para nêutrons considera todas as reações permitidas pela avaliação das seções de choque

(ENDF/B-VI por exemplo) e obviamente inclui a possibilidade de cálculo de auto-valores,  $k_{eff}$ , para sistemas fisseis. A faixa de energia para nêutrons vai de  $10^{-11}$  MeV a 20 MeV. Para fótons, o código considera espalhamentos coerente (a partícula espalhada tem direção definida e mesma energia em relação à incidente - colisão elástica) e incoerente (não tem direção definida nem a mesma energia - Efeito Compton. A colisão é inelástica e a diferença de energia traduz-se em ganho de temperatura - vibração do átomo). Também leva em conta a absorção fotoelétrica com a possibilidade de emissão fluorescente, a absorção com produção de pares e, conseqüente, emissão da radiação de aniquilação e bremsstrahlung. Para fótons, a faixa de energia pode variar entre 1 keV a 100 GeV. Para o transporte de elétrons, a faixa de energia vai de 1 keV a 1 GeV e o modelo utiliza uma redução contínua de velocidades que inclui pósitrons, raios X e bremsstrahlung.

MCNP4B permite a obtenção de uma ampla gama de resultados através dos diferentes tipos de registradores ("tallies") e possui inúmeras técnicas de redução de variância. O código conta ainda com suporte para processamento paralelo através de PVM, alocação dinâmica de memória, testes estatísticos dos "tallies" e visualização gráfica bidimensional das seções de choque e da geometria. MCNP pode ler os dados das bibliotecas de seções de choque de arquivos formatados ASCII ou de arquivos binários. As bibliotecas são distribuídas pelo RSICC em ASCII pois este formato é transportável, porém, é conveniente transformá-las para arquivos binários que são menores e podem ser lidos mais rapidamente.

A Compilação do MCNP requer compiladores padrão Fortran77 e ANSI C. MCNP4B é formado por cerca de 360 sub-rotinas escritas em Fortran e C que podem ser compiladas com GNU g77/gcc em PCs rodando Linux. Nenhuma versão de compiladores Fortran90 em sistemas Unix é suportada na versão 4B. PVM é necessário para processamento paralelo em "clusters" (GOORLEY, 1997).

A versão 4B não dispõe de nenhum tipo de interface gráfica para elaboração de arquivos de entrada de dados. Esses arquivos serão posteriormente lidos pelo MCNP e devem ser escritos da maneira tradicional, via editores de textos. Um arquivo de entrada de dados para o MCNP deve conter as informações pertinentes ao sistema físico que se deseja simular, a saber: a especificação da geometria, descrição dos materiais, seleção das seções de choque, posição e características da fonte de partículas, especificação das respostas

desejadas ("tallies") e, finalmente, se necessário (ou desejado) uma técnica de redução de variância.

# 3.2.2 ORIGEN – Cálculo de Evolução Isotópica

Materiais expostos a nêutrons estão sujeitos a um processo de transmutação dos átomos dos elementos químicos que constituem estes materiais. Formam isótopos diferentes ou mesmo diferentes elementos químicos. Neste trabalho os cálculos para quantificar as variações na composição química dos materiais expostos a fluxos neutrônicos são realizados com o software ORIGEN, versão 2.1.

O código ORIGEN foi escrito no ORNL, EUA, no início dos anos 70. É uma ferramenta computacional para cálculos de queima e decaimento de materiais radioativos objetivando determinar as características do combustível nuclear irradiado (composição química/isotópica, liberação de calor residual, radioatividade, radiotoxicidade, taxas de absorção de nêutrons e de fissões, número de nêutrons e de fótons emitidos), as quais, são a base para o estudo e projeto de instalações de reprocessamento de combustível, cascos para transporte de combustível irradiado e instalações para transporte, tratamento e deposição de rejeitos radioativos, dentre outras aplicações.

Em 1980, o ORNL passa a distribuir a versão ORIGEN2, a qual, inteiramente escrita em Fortran77 incorpora atualizações nos modelos de reatores, seções de choque, produtos de fissão e dados para as cadeias de decaimento. Os 1300 nuclídeos contidos no banco de dados da versão 2 foram divididos em três conjuntos com 130 actinídeos, 850 produtos de fissão e 720 produtos de ativação (a soma dos 3 conjuntos é diferente de 1300 porque vários nuclídeos aparecem em mais de um conjunto). Em agosto de 1991, o RSICC começou a distribuir a versão 2.1. Ela inclui versão executável em microcomputadores (Windows 95/NT) e bibliotecas de seções de choque adicionais para cálculos padrão e de queima estendida de PWRs e BWRs. Para implantar o ORIGEN2.1 em microcomputadores rodando Linux pequenos ajustes no código fonte (tamanho de vetores, tipos de variáveis e formatos) se fizeram necessários, entretanto, nenhuma alteração na metodologia e seqüência de cálculos foi efetuada. Neste trabalho de implantação e adaptação do código para Linux foi utilizado o compilador Fortran GNU g77, versão 0.5.26.

A maior parte dos cálculos efetuados pelo ORIGEN são essencialmente simples, envolvendo leitura e armazenamento de dados, conversão das unidades de massa para outras grandezas e escrita de resultados. A parte de cálculo propriamente consiste em última instância na determinação da taxa na qual a massa de determinado nuclídeo muda em função do tempo e que pode ser expressa por,

$$\frac{dX_i}{dt} = \sum_{j=1}^{N} l_{ij} \lambda_j X_j + \phi \sum_{k=1}^{N} f_{ik} \sigma_k X_k - (\lambda_i + \phi \sigma_i + r_i) X_i + F_i \qquad i = 1, 2, ..., N$$
(3.1)

sendo,

 $X_i$  = densidade atômica do nuclídeo i

N = número de nuclídeos

 $l_{ij}$  = fração da desintegração radioativa de outros nuclídeos que leva à formação do nuclídeo i

 $\lambda_i$  = constante de decaimento radioativo do nuclídeo i

$$\phi =$$
 fluxo de nêutrons

 $f_{ik}$  = fração da absorção de nêutrons por outros nuclídeos que leva à formação do nuclídeo i

 $\sigma_k$  = seção de choque de absorção de nêutrons pelo nuclídeo k

 $r_i$  = taxa de remoção contínua do nuclídeo i do sistema

 $F_i$  = taxa de alimentação contínua do nuclídeo i

Uma vez que N nuclídeos estejam sendo considerados, então N equações como a equação 3.1 devem ser resolvidas (uma para cada nuclídeo). A solução desse sistema de equações diferenciais fornece a quantidade de cada nuclídeo ( $X_i$ ) presente ao final de cada intervalo de tempo. Teoricamente é possível que cada nuclídeo seja produzido por todos os outros (N-1). Entretanto, na realidade o número médio de nuclídeos pais é inferior a uma dúzia. Assim, para um caso que considere 1700 nuclídeos, tem-se 1688 (1700 – 12) coeficientes  $X_i$  iguais a zero no lado direito da equação 3.1. O mesmo se verifica para todos os nuclídeos. O resultado é uma matriz com 1700 x 1700 coeficientes de  $X_j$  extremamente esparsa (~ 99% dos elementos da matriz seriam zero). Técnicas de indexação que armazenam somente os elementos não-zero da matriz de coeficientes são então utilizadas para permitir menor armazenamento e manipulação de dados.

ORIGEN armazena nos vetores internos as composições (em gramas) dos nuclídeos constituintes de cada material a cada intervalo de queima. As demais características de interesse (Watts, Curie, etc.) são obtidas pela multiplicação dessa massa do nuclídeo pelo fator de conversão apropriado. Esses fatores de conversão específicos para cada nuclídeo são gerados a partir dos dados armazenados nas bibliotecas de fótons e de decaimento radioativo.

São três tipos principais de bibliotecas de dados utilizados pelo ORIGEN2.1: decaimento radioativo, produção de fótons e seções de choque. Os dados de decaimento são necessários em todos os cálculos com ORIGEN2.1 e contêm a lista de nuclídeos, as meiasvidas e cadeias de decaimento, a energia recuperável a cada evento da seqüência de decaimento, as composições isotópicas naturais dos elementos e a máxima concentração permissível por radionuclídeo (permite calcular a radiotoxicidade relativa de um material nuclear – Ci/m<sup>3</sup> de ar ou de água). Todos os dados referentes a decaimento são armazenados em um único arquivo chamado *Decay.lib*.

O segundo tipo refere-se a dados sobre a produção de fótons. Ele fornece o número de fótons e a energia liberada em função do tempo de irradiação ou decaimento em uma estrutura de 18 grupos de energia. A biblioteca inclui fótons de raios gama, de raios X, de reações ( $\alpha$ , n), raios gama de produtos de fissão das fissões espontâneas e bremsstrahlung. Gamas prontos oriundos de fissão e captura neutrônica não são incluídos. Os dados referentes à produção de fótons dependem do tipo de bremsstrahlung, que, por sua vez, depende do meio, portanto, eles são agrupados em três arquivos distintos, um para bremsstrahlung em UO<sub>2</sub> e outro em H<sub>2</sub>O e o terceiro para nenhum bremsstrahlung.

Finalmente, os dados sobre seções de choque. Os tipos de seções de choque utilizadas pelo ORIGEN2.1 são  $(n, \gamma)$ , para estados fundamentais e excitados, (n, 2n), para estados fundamentais e excitados, (n, 3n) e (n, fissão) para actinídeos, (n, p) e  $(n, \alpha)$  para produtos de ativação e produtos de fissão. Essas seções de choque são colapsadas a um único grupo de energia sendo, portanto, fortemente dependentes do tipo de reator e do tipo

de combustível. Assim, enquanto que as bibliotecas de dados de decaimento e produção de fótons são, a princípio, suficientes para todo e qualquer caso, os dados para as seções de choque efetivas são, por sua vez, fortemente dependentes dos materiais/geometria (autoblindagem, concentração de nuclídeos e ligação dos átomos na molécula) e do tipo de reator (espectro de nêutrons típico do sistema). Bibliotecas de seções de choque, a um grupo, específicas para PWRs e BWRs, utilizando Urânio e/ou Plutônio, para PWRs utilizando Tório, PWRs e BWRs com queima extendida, CANDU, LMFBR utilizando o ciclo Urânio-Plutônio ou ciclo do Tório e uma biblioteca genérica com dados térmicos, todas previamente preparadas (utilizando composições detalhadas - ainda que genéricas do combustível fresco e do material estrutural que formam o elemento combustível típico de cada tipo de reator), são disponibilizadas no ORIGEN2.1 e armazenadas em aproximadamente quarenta arquivos. Entretanto, apesar de poder contar com essas seções de choque originais do ORIGEN2.1 elas raramente serão utilizadas nas simulações realizadas neste trabalho. Ao invés disto, as seções de choque a um grupo serão geradas especificamente para os sistemas simulados. Este tratamento das seções de choque será discutido na seção 3.2.3.

O arquivo de entrada de dados para o ORIGEN2.1 deve fornecer informações sobre:

- As bibliotecas de dados pertinentes para o decaimento radioativo, seções de choque e fótons;
- Composição do combustível fresco (não irradiado);
- ✓ Irradiação (Queima);
- ✓ Adição e remoção de materiais;
- ✓ Decaimento.

Para iniciar os cálculos de irradiação e decaimento o usuário deve especificar a composição inicial do material a ser irradiado, o fluxo de nêutrons ou a potência (para irradiação somente) e o intervalo de tempo da irradiação ou decaimento (para longas irradiações o tempo total deve ser dividido em vários intervalos a fim de produzir resultados mais precisos).

A versatilidade e simplicidade do ORIGEN permitiram sua ampla utilização para obter informações de bases de projeto de engenharia e operação de instalações do ciclo do combustível nuclear. As informações sobre calor de decaimento são usadas para determinar a carga térmica em piscinas de combustível, cascos de transporte, instalações de reprocessamento e deposição de rejeitos. As informações sobre fótons e nêutrons são usadas como termos fonte de radiação para análises de blindagem envolvendo material irradiado. A composição do combustível irradiado é empregada em projeto de processos de separação em instalações de reprocessamento e em análises de risco que necessitem definir os materiais passíveis de liberação por uma seqüência de acidentes postulada.

3.2.3 MONTEBURNS – Acoplamento do Cálculo de Transporte por Monte Carlo ao de Evolução Isotópica

MONTEBURNS é uma ferramenta computacional inteiramente automatizada que acopla o código de transporte por Monte Carlo, MCNP4B, com o código de queima e decaimento radioativo, ORIGEN2.1. Ele vem para completar a metodologia de simulação adotada para o reator TRIGA IPR – R1. O sistema de cálculo englobando estes três códigos permite a completa simulação neutrônica e isotópica do reator (e de outros sistemas nucleares).

MONTEBURNS foi desenvolvido no Laboratório Nacional de Los Alamos, EUA, por Holly Trellue e David Poston (POSTON e TRELLUE, 1999) e é distribuído pelo RSICC desde 1999. Neste trabalho é utilizada a versão 1.0 do código. Ela contém versão executável apenas em estações Sparc-SUN rodando Solaris e microcomputadores rodando WindowsNT. Entretanto, a implantação em microcomputadores Linux é direta e necessita apenas de um compilador Fortran77 adequado. A parte principal do código foi escrita em Fortran77 mas a interface entre MCNP, ORIGEN e MONTEBURNS, que roda os códigos e processa os dados intermediários é um "script" escrito em *Perl*, portanto, é imprescindível que este software esteja instalado no computador (o Perl é um software gratuito que é normalmente distribuído junto com sistemas UNIX e que pode também ser baixado diretamente da internet). Pode-se então dizer que MONTEBURNS tem duas partes. O script escrito na linguagem Perl, chamado *Monteburns.pl*, e o programa em Fortran77, chamado *Monteb*. Pequenas modificações no script Perl permitem, desde que um executável "paralelizado" do MCNP esteja disponível, o processamento em paralelo em "clusters" Linux.

A figura 3.1 é um diagrama que esquematiza o acoplamento e as interações entre os códigos. O MCNP4B calcula as seções de choque a um grupo de energia e os fluxos de nêutrons que serão utilizados pelo ORIGEN2.1 nos cálculos de queima. A seguir, ORIGEN2.1 faz os cálculos de queima e/ou decaimento e obtém as novas composições isotópicas dos materiais, as quais, por sua vez serão transferidas e usadas pelo MCNP em um próximo ciclo de queima. Este processo se repete conforme especificação do usuário. MONTEBURNS é completamente automatizado, ou seja, com apenas um único comando de linha todo o "script" é executado, sendo toda a seqüência de execuções de MCNP, ORIGEN e Monteb realizada sem a necessidade de interferência do usuário. O fluxo de dados entre os códigos bem como a preparação dos novos arquivos de entrada de dados para os códigos é inteira e automaticamente efetuado por Monteb. Essa plena automatização do sistema poupa tempo e principalmente, elimina a possibilidade de erros na transferência de dados, que costuma ocorrer quando o usuário se vê obrigado a manipular um grande número de arquivos de entrada e saída dos códigos.

Já foi mencionado que as seções de choque oriundas das bibliotecas do ORIGEN raramente são utilizadas neste trabalho. Uma vez que o sistema de cálculo permite gerar automaticamente seções de choque a um grupo para o ORIGEN a partir do banco de dados de seções de choque ponto a ponto do MCNP4B, esta torna-se a opção preferida. A escolha justifica-se por serem os dados nucleares do MCNP mais completos e oriundos de avaliações mais recentes (em geral ENDF/B-VI contra ENDF/B-IV). Além disto, a colapsação a um grupo pode ser realizada considerando o espectro, os materiais e geometrias exatos do sistema sendo simulado e cujas características particulares são especificadas no MCNP.

Uma vez esclarecido que (e porque) as seções de choque utilizadas pelo ORIGEN advêm do MCNP, cabe agora justificar as raras situações em que algumas seções de choque oriundas das bibliotecas originais do ORIGEN precisam ser utilizadas nas simulações. Isto ocorre, excepcionalmente, para aqueles nuclídeos cujos dados não existam nas bibliotecas do MCNP ou para nuclídeos cuja contribuição, nas reações de absorção ou fissão e ainda a massa ou densidade atômica, seja desprezível e não justifica o esforço extra que o cálculo

das seções de choque exige. O usuário dispõe de recursos simples para informar na entrada de dados quais nuclídeos devem ter suas seções de choque calculadas e substituídas no ORIGEN.

A variação no valor das seções de choque efetivas, devido às mudanças nas composições isotópicas dos materiais provocadas pela irradiação, deve ser considerada a fim de produzir resultados acurados. As seções de choque efetivas a um grupo devem representar o valor médio para cada uma das etapas de queima analisadas. Na seqüência de cálculo o ORIGEN é executado até a metade de cada etapa de queima e as composições isotópicas resultantes (que caracterizam o meio do intervalo de queima) alimentam o MCNP que, então, calcula os fluxos e seções de choque efetivas que alimentarão o ORIGEN em uma segunda execução para fornecer as composições isotópicas no fim da etapa de queima. Este procedimento assume que a composição isotópica do sistema no meio da etapa de queima é uma aproximação razoável da composição sobre toda a etapa e que as seções de choque também são representativas do todo. É muito importante, portanto, que um período longo de irradiação seja quebrado em intervalos menores.



Figura 3.1 – Diagrama das interações do sistema MONTEBURNS/MCNP/ORIGEN2.

#### CAPÍTULO 3 – METODOLOGIA

É também muito importante que as seções de choque usadas no primeiro cálculo de queima sejam adequadas ao sistema simulado, pois se não o forem as composições calculadas para o meio do intervalo não serão representativas. A figura 3.2 ilustra o procedimento (predictor step) adotado por MONTEBURNS para assegurar que seções de choque representativas do sistema sejam utilizadas. MONTEBURNS automaticamente adiciona o "predictor step" na primeira etapa do cálculo de queima porque as seções de choque utilizadas no início do cálculo (queima zero), quando ORIGEN é executado pela primeira vez, podem ser inadequadas para o sistema simulado, uma vez que elas advêm das bibliotecas originais do ORIGEN2.1. Este problema pode ser parcialmente evitado fornecendo uma biblioteca inicial que tenha sido gerada pelo MONTEBURNS em um cálculo prévio ou em uma simulação anterior de um sistema semelhante, ao invés de usar uma das bibliotecas originais do ORIGEN2.1. Para todas as etapas de queima seguintes, MONTEBURNS irá usar as secões de choque calculadas para o intervalo imediatamente anterior, de modo que independentemente de quantas etapas de queima sejam necessárias para simular a totalidade do período de irradiação, o "predictor step" é necessário apenas na primeira etapa. Uma vez terminado o cálculo, MONTEBURNS apresenta em um arquivo de saída os parâmetros (espectro energético de nêutrons, massa de nuclídeos, etc.) calculados no meio do primeiro intervalo de queima usando os dados iniciais e os dados do "predictor step". Deste modo, permite ao usuário comparar os resultados e verificar a necessidade, ou não, de obter seções de choque mais representativas via utilização de menores intervalos de queima ou do aumento no número de "predictor steps".



Figura 3.2 – Seqüência de operações na primeira etapa do cálculo de queima.

Como mostra a figura 3.1, o sistema exige que o usuário forneça quatro arquivos de entrada de dados. O primeiro, MBXS.INP, não é uma entrada específica para o sistema que está sendo simulado, mas um arquivo de uso geral que deve apenas conter a lista com os identificadores de seções de choque do MCNP. Há também um arquivo cujo uso é opcional (INPUT.FEED), o qual deve conter os dados sobre a adição/remoção de material do sistema durante cada etapa de queima, as alterações de potência e o remanejamento (shuffling) de material de uma zona para outra. Se nenhuma destas alterações for pertinente ao sistema particular em estudo, este arguivo é desnecessário. Os outros dois arguivos contêm a descrição do sistema a ser simulado. Um deles (INPUT) é a entrada de dados do MCNP que descreve o sistema que está sendo simulado utilizando todas as opções, recursos e limitações disponíveis no código. Esse modelamento do sistema com MCNP constitui a etapa mais complexa de toda a metodologia e neste arquivo deve-se especificar detalhadamente a geometria do sistema, materiais e suas composições (obviamente no caso de materiais combustíveis trata-se somente da composição inicial), especificação da fonte, "tallies", seções de choque e demais informações secundárias demandadas pelo código. Por último, o arquivo INPUT.INP é a entrada de dados do Monteb e é um arquivo de elaboração muito simples contendo informações sobre os ciclos de queima e decaimento, potência e materiais combustíveis, que permitem a Monteb construir e manusear os arquivos de entrada e saída do ORIGEN.

O sistema é capaz de fornecer um grande número de resultados conforme as especificações do usuário. Informações quantitativas sobre o  $k_{eff}$  em função da irradiação (queima), massa de produtos de fissão e transurânicos, atividade dos radionuclídeos, calor de decaimento e radiotoxicidade por inalação e ingestão são escritas por "default" na saída de dados. Obviamente, toda a informação padrão fornecida isoladamente pelo MCNP (ou pelo ORIGEN) como a distribuição espacial e espectral do fluxo neutrônico, distribuição de potência, etc., também pode ser obtida.

3.2.4 SCALE – Simulação Independente das Opções de Armazenamento Temporário do Combustível Gasto

Na impossibilidade de conseguir valores experimentais para os parâmetros dos dispositivos propostos para armazenamento temporário dos elementos combustíveis gastos (ver seção 3.5) serão feitas simulações com dois sistemas de códigos independentes, MCNP4B e SCALE4.4A, e os resultados comparados. SCALE surgiu a partir de uma proposta da NRC (U.S. Nuclear Regulatory Commission) para que fosse desenvolvido um sistema integrado para análises de criticalidade, blindagem e transferência de calor de dispositivos para o transporte e armazenamento de material nuclear. Seu desenvolvimento foi orientado por critérios como o foco em aplicações relacionadas a instalações do ciclo do combustível nuclear, projetos de dispositivos para transporte de combustível, uso de códigos computacionais e dados nucleares já bem estabelecidos e o emprego de módulos de controle para automatizar o uso dos diferentes códigos e dados.

O conceito original do SCALE era fornecer seqüências de cálculos padronizadas onde o usuário tivesse poucas opções de análise, além da modelagem geométrica e de materiais. Uma importante característica do SCALE é a capacidade de simplificar o esforço do usuário necessário para preparar as misturas de materiais e efetuar o processamento das seções de choque (dependentes do problema) de modo adequado. A estrutura modular do SCALE automatiza e padroniza a execução dos sistemas de análise disponíveis em três seqüências fundamentais, a saber: Seqüência de Análise de Segurança quanto à Criticalidade (CSAS), Seqüência de Análise de Blindagem (SAS) e Seqüência de Análise de Transferência de Calor (HTAS). Mais de uma seqüência de análise pode estar disponível por módulo de controle e, resumidamente, são elas:

CSAS – é o módulo de controle projetado para execução de toda a seqüência de análise de criticalidade, exceto aquelas que usem o código KENO-VI.

CSAS6 – é o módulo de controle projetado para execução da seqüência de análise de criticalidade usando KENO-VI.

ORIGEN-ARP – é a seqüência de queima e decaimento para combustível nuclear irradiado. O usuário pode criar sua própria biblioteca de seções de choque específica para o seu tipo de elemento combustível. ORIGEN-ARP é uma interface gráfica para Windows do código ORIGEN.

SAS1 – é um módulo de controle para realizar processamento de dados, análise de blindagem das radiações e avaliação de dose em sistemas que possam ser adequadamente modelados em apenas uma dimensão.

SAS2H – é um módulo de controle que processa seções de choque de elementos combustíveis, calcula o espectro da fonte de nêutrons e fótons e avalia taxas de dose de cascos para elementos combustíveis irradiados, usando uma análise de blindagem unidimensional. Em geral SAS2H é usado para a parte de queima e decaimento da análise e SAS1 ou SAS4 é usado no cálculo de blindagem propriamente. Essa abordagem foi utilizada neste trabalho. As bibliotecas de dados para os combustíveis simulados foram preparadas com SAS2H e os cálculos de blindagem foram feitos com SAS4.

SAS3 – realiza o processamento dos dados e a análise de blindagem em sistemas para os quais o usuário especifica a distribuição da fonte de radiação, a qual, deve ser modelada em três dimensões.

SAS4 – é o módulo de controle que permite o cálculo de taxas de dose de radiação exteriores ao casco de transporte/armazenamento via análise tri-dimensional por Monte Carlo.

HTAS1 – é um módulo de controle que gera o "input" necessário para o código HEATING7.2 e, automaticamente, o manipula para efetuar uma análise térmica bidimensional (R-Z) para contêineres de transporte sob condições normais de operação e/ou condições de acidente (incêndio e pós-incêndio) especificadas pelo órgão licenciador.

Como se vê, o sistema SCALE possui amplas capacidades. As suas aplicações se estendem bem além da análise de cascos, indo às instalações de fabricação e

reprocessamento de combustível nuclear, instalações de armazenamento de rejeitos, análise e projeto de experimentos críticos e, recentemente, algumas aplicações em reatores.

#### 3.3 A Validação do MONTEBURNS

Para validar a aplicação do sistema MONTEBURNS ao IPR – R1 foram utilizados o experimento "benchmark" de criticalidade para reatores TRIGA descrito por MELE et al (1994) e PERSIC et al (2000) e o experimento de medida de queima de U235 em placas de um elemento combustível MTR descrito por DALLE et al (2003). Tem-se a seguir uma rápida apresentação destes experimentos. Maiores detalhes nas citadas referências.

## 3.3.1 Cálculo de $k_{eff}$ de Reatores TRIGA

Os experimentos "benchmark" de criticalidade TRIGA Mark II foram realizados no Instituto Jozef Stefan, Ljubljana, Eslovênia. Medições de reatividade foram efetuadas para duas configurações de núcleo carregadas com combustível fresco chamadas núcleos 133 e 134. Alguns anos depois, estas duas configurações foram refeitas e novas medições efetuadas quando a queima média dos elementos combustíveis atingiu 1,22 MWd (2,8% de queima de Urânio 235), no núcleo 133.1 e, 1,15 MWd (2,6% de queima de Urânio 235), no núcleo 133.1 e, 1,15 MWd (2,6% de queima de Urânio 235), no núcleo 134.1. Esses experimentos de criticalidade para o "TRIGA de Ljubljana" integram o "International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project" (NEA, 1999) e são bem conhecidos e utilizados como "benchmark" para validação de códigos neutrônicos e métodos de cálculo para reatores TRIGA. MONTEBURNS foi usado para simular esses núcleos e os valores do fator de multiplicação de nêutrons efetivo,  $k_{eff}$ , de cada núcleo, foi calculado. Descrições mais detalhadas desse "benchmark", incluindo descrição das geometrias e materiais do reator, métodos de medidas e incertezas podem ser encontrados em MELE et al (1994), JERAJ e RAVNIK (1999) e PERSIC et al (2000).

# 3.3.2 Experimento para Medida de Queima de U235 em Placas MTR com Combustível U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al Irradiado

A ausência na literatura de resultados experimentais de exames pós-irradiação que permitam quantificar a composição isotópica do combustível irradiado de reatores de pesquisa TRIGA é total. A oportunidade de conseguir informações quantitativas sobre combustível queimado utilizado em reatores de pesquisa foi proporcionada pela Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA), através de um projeto de pesquisa conjunto envolvendo participantes de cinco países latino americanos (MAIORINO et al, 2002). Com o intuito de obter dados experimentais que permitissem validar e melhorar as metodologias de cálculo para caracterização do combustível queimado empregadas nos reatores de pesquisa latino-americanos, um experimento "benchmark" de queima foi iniciado. Os experimentos foram realizados em um elemento combustível tipo MTR irradiado no reator de pesquisas RA-3, do Centro Atômico Ezeiza, em Buenos Aires, Argentina.

A figura 3.3 mostra a geometria do elemento combustível analisado. Este elemento era um protótipo em teste como parte do programa de qualificação de elementos combustíveis de baixo enriquecimento e alta densidade conduzido pela Comissão Nacional de Energia Atômica Argentina (CNEA). A parte ativa (em vermelho na figura 3.3) é constituída pela liga de  $U_3Si_2$ -Al e o revestimento das placas (em azul) e a estrutura do elemento (em cinza) são de Alumínio. Os experimentos foram realizados pelos pesquisadores da CNEA em suas instalações de "células quentes" e demais laboratórios. A queima em uma placa externa e em outra interna, dentre as dezenove placas que constituíam o elemento combustível, foi determinada através de análises químicas destrutivas, medindo-se a depleção de Urânio235 através de espectrometria de massa. Esse experimento, com os métodos e procedimentos de análise, resultados, dados geométricos e de materiais dos elementos e do reator, histórico de irradiação e demais informações pertinentes, é detalhadamente descrito por DALLE et al (2003) no apêndice I. Apesar de não se referir especificamente a combustível TRIGA, esse trabalho representou uma oportunidade única de conseguir dados experimentais quantitativos da queima de combustível para validação de metodologias de cálculo de reatores de pesquisa. Enfim, cabe lembrar que um experimento similar utilizando um combustível queimado do TRIGA IPR – R1 não poderia ser conduzido no Brasil, devido à presente inexistência no país de células quentes adequadas.


Figura 3.3 – Modelo MCNP do elemento MTR com combustível U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al irradiado (dimensões em cm).

# 3.4 A Simulação do Reator TRIGA IPR – R1

A simulação do reator IPR – R1 começa pelo núcleo BOL e evolui até o núcleo atual contendo 63 elementos combustíveis. Valores de excesso de reatividade, valor integral de reatividade das barras de controle, reatividade de elementos combustíveis, fluxos neutrônicos e distribuições de potência são calculados e comparados com resultados experimentais sempre que possível. Comparações com resultados de simulações prévias usando códigos de difusão também são efetuadas. As simulações prosseguem além do núcleo atual tentando obter informações sobre o fim de vida do reator e do combustível gasto. Neste estudo assume-se como fim de vida uma configuração com a totalidade dos 68 elementos combustíveis TRIGA que o CDTN dispõe. Essa configuração é queimada até que o excesso de reatividade torne-se negativo.

#### 3.4.1 Do Início de Vida (BOL) ao Núcleo Atual

A simulação considerou a evolução do reator desde o início de vida em 1960 (figura 3.4) até 06 de novembro de 2004, exatos 44 anos de operação (figura 3.5). O histórico de queima e decaimento foi obtido com base em registros nos livros de operação do reator desde a primeira criticalidade em 1960 até o presente. Obviamente, é impossível simular na prática todos os detalhes da operação do reator nesses 44 anos. Portanto, foi adotado um modelo simplificado para o histórico de queima do reator, considerando apenas as mudanças na potência nominal de operação, inserção ou substituição de elementos combustíveis no núcleo e energia dissipada, a saber:

- De 06/11/1960 a 03/06/1964, 56 elementos combustíveis dissipando continuamente 149 MWh à potência constante de 30 kW, seguido por 1098 dias de decaimento.
- De 03/06/1964 a 11/07/1967, 57 elementos combustíveis dissipando continuamente 31 MWh à potência constante de 30 kW, seguido por 1090 dias de decaimento.
- De 11/07/1967 a 23/07/1973, 57 elementos combustíveis (substituição do elemento 1137 pelo elemento 1147) dissipando continuamente 200 MWh à potência constante de 100 kW, seguido por 2119 dias de decaimento.
- iv. De 23/07/1973 a 07/1996, 58 elementos combustíveis dissipando continuamente 1224 MWh à potência constante de 100 kW, seguido por 7885 dias de decaimento.
- v. De 07/1996 a 05/2002, 59 elementos combustíveis dissipando continuamente 197 MWh à potência constante de 100 kW, seguido por 2043 dias de decaimento.
- vi. De 05/2002 a 06/11/2004, 63 elementos combustíveis dissipando continuamente 91 MWh à potência constante de 100 kW, seguido por 873 dias de decaimento.



Figura 3.4 - Configuração inicial do IPR - R1 (configuração BOL, 56 EC).



Figura 3.5 - Configuração atual do TRIGA IPR - R1 (63 EC).

A figura 3.5 além de representar a configuração atual, resume o histórico de queima dos elementos combustíveis do IPR – R1. Os elementos com revestimento de alumínio nomeados na figura como EC dos anéis B, C, D e E (representados em diferentes tonalidades azuis) mais o elemento 1137 formavam o núcleo inicial contendo 56 elementos combustíveis. Os demais foram sendo adicionados no núcleo ao longo do tempo. O elemento 1179 foi inserido em 1964 para formar o núcleo com 57 elementos. Em 1967, o elemento 1137 teve o pino de uma de suas extremidades danificado e foi retirado do núcleo sendo substituído pelo elemento 1147. O elemento 1214 foi inserido em 1973 para formar o núcleo com 58 elementos. Em 1996 o elemento 1137 foi consertado e retornou ao núcleo com o  $59^{\circ}$  elemento. Os quatro elementos de aço inoxidável foram inseridos em 2002, formando o núcleo atual com 63 elementos, ocasião em que também ocorreu a mudança de posição das barras de Controle e de Segurança das posições D1 e D10 para C1 e C7. Não há registro de outras alterações no posicionamento dos demais elementos combustíveis.

Segundo a General Atomics, a composição inicial dos 68 elementos combustíveis vendidos ao CDTN era como mostrado na tabela 3.1. Nos elementos mais antigos, com revestimento de alumínio, a razão entre o número de átomos de Hidrogênio para o número de átomos de Zircônio na liga era em média igual a 1, enquanto que para os elementos com revestimento em inox (os números destes elementos começam com 6 ou 7) esta razão é em média de 1,62. Para fins de cálculo das densidades atômicas iniciais dos combustíveis foi considerado que os elementos em um mesmo anel, se do mesmo tipo, têm as massas iguais, dadas pela média das massas dos elementos combustíveis que compõem o anel. As densidades atômicas dos materiais usados no modelo são calculadas pela equação 3.2,

$$N_i = \frac{W_i \rho N_a}{M_i} , \qquad (3.2)$$

onde  $N_i$ ,  $W_i$ ,  $\rho$ ,  $Na \in M_i$ , são, respectivamente, a densidade atômica do isótopo i, a fração de massa do isótopo i, a massa específica do material, o número de Avogadro e a massa atômica do isótopo i. Esses valores são apresentados na tabela 3.2.

Não foram encontradas informações precisas sobre a composição dos discos de veneno queimável presentes nos elementos com revestimento de alumínio. Sabe-se, apenas, que os discos são constituídos de tri-óxido de samário (Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) e alumínio manufaturados

via técnicas de metalurgia do pó e são responsáveis por inserir uma reatividade negativa, em um núcleo fresco e ligeiramente supercrítico, em torno de 1%  $\Delta$ k/k (1000 pcm). Estas informações serão utilizadas no capítulo 4 em cálculos para estimar a composição isotópica inicial dos discos.

Número do	Posição	Massa de	Massa de	Massa de
elemento	inicial	ZrH (g)	Urânio (g)	U235 (g)
1314	B1	2252,84	195,10	38,65
1188	B2	2240,47	194,47	38,52
1289	B3	2246,71	194,12	38,46
1286	<b>B</b> 4	2243,74	193,19	38,27
1230	B5	2256,41	193,15	38,26
1297	<b>B</b> 6	2247,20	192,59	38,15
1269	C1	2258,19	191,04	37,85
1298	C2	2252,94	191,05	37,85
1330	C3	2258,49	190,84	37,81
1315	C4	2250,96	190,66	37,77
1345	C5	2281,06	190,47	37,73
1235	C6	2249,97	190,35	37,71
1212	<b>C7</b>	2249,97	190,35	37,71
1222	C8	2250,27	190,15	37,67
1263	C9	2252,84	190,14	37,67
1351	C10	2247,30	189,67	37,57
1274	C11	2243,74	189,60	37,56
1311	C12	2247,79	189,49	37,54
1254	D2	2255,42	189,46	37,53
1206	D3	2256,61	189,10	37,46
1303	D4	2253,14	189,04	37,45
1287	D5	2253,43	188,84	37,41
1296	D6	2266,11	188,77	37,40
1282	D7	2251,75	188,70	37,38
1343	D8	2251,75	188,47	37,34
1196	D9	2247,79	188,36	37,31
1199	D11	2250,17	188,34	37,31
1347	D12	2248,19	188,17	37,28
1220	D13	2239,58	187,90	37,22
1218	D14	2255,02	187,84	37,21
1209	D15	2251,46	187,72	37,19
1280	D16	2253,43	187,71	37,19
1350	D17	2245,72	187,74	37,19
1272	D18	2257,69	186,94	37,03
1348	E1	2256,61	186,62	36,97
1197	E2	2247,50	186,54	36,95
0989	E3	2251,50	186,42	36,93

Tabela 3.1 - Composição inicial dos elementos combustíveis do IPR - R1.

Tabela 3.1 – Continuação				
Número do	Posição	Massa de	Massa de	Massa de
elemento	inicial	ZrH (g)	Urânio (g)	U235 (g)
1228	E4	2244,82	186,10	36,87
1173	E5	2246,51	186,01	36,85
1205	E6	2252,25	185,81	36,81
1195	E7	2244,53	184,73	36,60
1028	E8	2255,32	184,71	36,59
1130	E9	2219,08	184,18	36,49
1342	E10	2256,41	184,12	36,47
1025	E11	2246,90	183,12	36,28
1128	E12	2248,09	183,22	36,30
1114	E13	2247,60	185,65	36,78
1219	E14	2249,38	185,57	36,76
1301	E15	2254,23	185,52	36,75
1171	E16	2250,76	185,46	36,74
1224	E17	2263,63	185,39	36,73
1179	E18	2257,79	182,20	36,09
1214	E19	2244,03	191,19	37,87
1012	E20	2241,85	184,93	36,64
1162	E21	2237,60	184,38	36,53
1223	E22	2250,76	184,34	36,52
1137	E23	2248,59	185,06	36,66
1005	E24	2225,02	185,34	36,72
1147	E23	2241,46	182,46	36,15
7191	C11	2299	193	38
7192	C5	2292	192	38
7193	C9	2297	193	38
7194	C3	2293	193	38
7195		2295	193	38
7196		2294	193	38
7197		2297	193	38
7198		2297	193	38
6821TC		2305	193	38

...

Material	Nuclídeo	Fração de	Massa	Massa	Densidade
		massa	específica	atômica	atômica
			$(g/cm^3)$		(átom/bar.cm)
Combustível no	U235	0,01572	6,29	235,0439	2,5334e-04
anel B	U238	0,06364		238,0508	1,0126e-03
	Zircônio	0,91058		91,22	3,7811e-02
	H1	0,01006		1,00797	3,7804e-02
Combustível no	U235	0,01543	6,29	235,0439	2,4866e-04
anel C (e EC	U238	0,06245		238,0508	9,9370e-04
1214)	Zircônio	0,91204		91,22	3,7872e-02
	H1	0,01008		1,00797	3,7880e-02
Combustivel no	U235	0,01529	6,29	235,0439	2,4641e-04
anel D	U238	0,06187		238,0508	9,8447e-04
	Zircônio	0,91275		91,22	3,7901e-02
	H1	0,01009		1,00797	3,7917e-02
Combustivel no	U235	0,01508	6,29	235,0439	2,4302e-04
anel E (e ECs	U238	0,06104		238,0508	9,7126e-04
1179 e 1147)	Zircônio	0,91378		91,22	3,7944e-02
	H1	0,01010		1,00797	3,7955e-02
Combustível com	U235	0,01526	6,06	235,0439	2,3693e-04
revestimento de	U238	0,06226		238,0508	9,5445e-04
aço inoxidável	Zircônio	0,90626		91,22	3,6256e-02
	H1	0,01622		1,00797	5,8724e-02
Vareta de Zircônio	Zr	1,00000	6,49	91,22	4,2843e-02
Água	Hl	0,1119	0,9975	1,00797	6,6689e-02
	<b>O</b> 16	0,8881		15,9994	3,3344e-02
B <sub>4</sub> C	<b>B</b> 10	0,15522	2,51	10,0129	2,3432e-02
	B11	0,62478		11,0093	8,5778e-02
	С	0,22000		12,01115	2,7686e-02
Alumínio	A127	1,00000	2,7	26,9815	6,0261e-02
Aço inoxidável	Fe	0,6684	7,89	55,845	5,6860e-02
ANSI 304	Cr	0,1900		51,9961	1,7360e-02
	Ni	0,1000		58,6934	8,0948e-03
	Mn	0,0200		54,9380	1,7295e-03
	Si	0,0200		28,0855	3,3831e-03
	С	0,0008		12,01115	3,1643e-04
	Р	0,0004		30,9738	6,1353e-05
	S	0,0004		32,065	5,9256e-05
Sm <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Al	Al27	0,99000	2,7	26,9815	5,9659e-02
	016	0,00371		15,9994	3,7703e-04
	Sm147	0,0015		146,9146	1,6601e-05
	Sm149	0,00138		148,9169	1,5067e-05
	Sm150	0,00074		149,9170	8,0257e-06
	Sm152	0,00267		151,9195	2,8576e-05
Grafite	С	1,00000	1,67	12,01115	8,3728e-02
Ar	016	0,2221	0,0013	15,9994	1,0868e-05
	N14	0,7779		14,0031	4,3479e-05

Tabela 3.2 - Densidades atômicas dos materiais.

O modelo de cálculo despreza os efeitos das partidas, desligamentos e mudanças de potência durante as operações, bem como considera que toda a dissipação de energia é contínua durante cada uma das seis etapas de queima e todo o período de decaimento é considerado no final das etapas. Estas simplificações, aliadas às incertezas nas calibrações de potência térmica ao longo da vida do reator consistem nas principais fontes de erros na caracterização do combustível irradiado que podem ser creditadas ao modelo empregado.

Em todas as simulações de queima os nuclídeos Xe135, Sm149, Sm151, Pu239, Nd143, U236, Pm147, Rh103, Xe131, Cs133, Tc99, Nd145 e Pu240 são explicitamente listados para geração das seções de choque. Além destes, a geração de seções de choque é automática para aqueles nuclídeos com densidade atômica ou contribuição para as reações de absorção ou de fissão maiores que  $10^{-4}$ . Também a biblioteca *Thermal.lib* é usada como a fonte inicial das seções de choque do ORIGEN2.1.

Não foram quantificados na metodologia de simulação os erros atribuídos à simplificação do histórico de queima e à calibração da potência térmica do reator. Contudo, há registros de experimentos de calibração de potência com desvios de até 20% entre a potência térmica medida e aquela registrada pelos canais neutrônicos. Portanto, como os registros nos livros de operação do reator retratam a leitura dos canais neutrônicos, a simulação de queima carregará sempre, no mínimo, essa mesma incerteza.

Os dados nucleares utilizados advêm sempre da ENDF/B-VI ou ENDF/B-V, dependendo da disponibilidade do isótopo na biblioteca do MCNP, sem qualquer correção de temperatura (dados a 23 Celsius). A opção de fonte de criticalidade, *KCODE*, foi a utilizada nas simulações.

## 3.4.2 Núcleo EOL – Fim de Vida

A figura 3.6 mostra uma configuração contendo a totalidade dos 68 elementos combustíveis TRIGA disponíveis no CDTN. Essa configuração é assumida como núcleo EOL. O modelo de cálculo considera que os outros cinco elementos combustíveis com revestimento de aço inoxidável são inseridos no anel C do núcleo atual para formar a configuração EOL e esta configuração é queimada até que o excesso de reatividade torne-se

65

negativo. A potência do reator considerada durante toda esta etapa de queima também foi de 100 kW.



Figura 3.6 – Configuração EOL prevista para o TRIGA IPR – R1 (68 EC).

#### 3.4.3 Parâmetros para Comparação de Resultados

Ao longo dos anos diversas medições de reatividades foram efetuadas. Esses resultados experimentais foram registrados em inúmeras publicações, relatórios internos do CDTN e nos livros de operação do reator que foram pesquisados na biblioteca e arquivos do CDTN. Foram assim obtidos os valores de excesso de reatividade e reatividades de barras de controle em todas as ocasiões em que houve alteração no número de elementos combustíveis no núcleo (SILVA, 1971; RODRIGUES, 1972; POLASTRO, 1980; SOUZA e RESENDE, 1996; CDTN, 2000; SOUZA et al, 2001). Isto permitirá comparar os valores calculados com aqueles medidos nessas ocasiões. Há também registros de medições de reatividades de alguns elementos combustíveis (SOUZA e RESENDE, 1997), por ocasião do carregamento do 59<sup>e</sup> elemento, em 1996, e do fluxo de nêutrons térmicos no tubo central e na mesa giratória para a configuração com 63 EC (SOUZA et al, 2001).

Esses experimentos não foram realizados com intuito de avaliação e validação de metodologias de cálculo e sim como parte dos procedimentos de operação do reator. Desse modo, em geral carecem de informações precisas sobre o posicionamento das amostras, procedimentos e precisões de medidas que permitam simular exatamente as condições do experimento. Portanto, especialmente as medidas de fluxo de nêutrons não permitem a comparação direta e rigorosa dos resultados. Apesar disso, são resultados experimentais e fornecem informações valiosas sobre a adequação da metodologia de cálculo.

Os resultados de simulações prévias (DALLE 1999, 2000, 2003) por difusão de nêutrons com WIMSD4 e CITATION também são usados para comparação com os valores calculados via Monte Carlo. A comparação dos valores calculados pelos dois métodos permitirá avaliar os possíveis ganhos de precisão na simulação por Monte Carlo.

### 3.5 Opções para o Armazenamento Temporário do Combustível Gasto

### 3.5.1 Casco Duplo Propósito – Estocagem a Seco, TRIGA e MTR

O armazenamento a seco do combustível nuclear gasto, após um período inicial para decaimento e resfriamento em piscina, tem encontrado aplicação crescente. Uma opção já licenciada e empregada em algumas instalações e que tem despertado crescente interesse consiste no emprego dos cascos tradicionalmente usados para o transporte de material nuclear também para estocagem temporária a seco (STUART, 1991; THAMM, 1999; THOMASSON, 2000; IAEA, 2000; NETO e MOURÃO, 2002). Esses cascos de transporte sofrem alterações no projeto básico de modo a atender não só aos critérios de segurança para transporte de material nuclear irradiado, mas também aos critérios para armazenamento temporário do combustível. Esses cascos duplo propósito têm como grande desvantagem o custo financeiro sensivelmente mais alto que o de outros dispositivos de armazenagem a seco (cascos de concreto, silos ou containeres). Por outro lado, fornecem a máxima flexibilidade, pois permitem o transporte do material para diferentes instalações sem necessidade de qualquer manuseio extra dos elementos combustíveis, somado à facilidade de acesso aos elementos. Outra vantagem refere-se à natureza intrinsecamente modular desse tipo de sistema.

Como uma opção viável para a futura estocagem temporária e eventual transporte dos elementos combustíveis gastos do IPR – R1, é apresentado um modelo de casco duplo propósito, o qual, será avaliado quanto aos parâmetros de segurança quanto à criticalidade, blindagem e carga térmica devida ao calor de decaimento. Essa análise irá extrapolar a utilização do casco como solução apenas para o combustível gasto do IPR – R1. Abarcará também a possibilidade de estocar e transportar combustíveis gastos de reatores MTR. Esse estudo adicional é justificado pela necessidade que o Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN), em São Paulo, vivencia atualmente de encontrar uma solução para a estocagem dos elementos combustíveis gastos do seu reator de pesquisas IEA – R1. Até o final desta década prevê-se o possível esgotamento da atual capacidade de armazenamento dos elementos combustíveis deste reator. Portanto, o casco duplo propósito pode vir a constituir-se em uma opção nacional para a gerência de combustível gasto dos reatores de pesquisa. As análises de criticalidade e blindagem são efetuadas com MCNP4B e, para permitir a comparação de resultados, também com SCALE4.4A. Não há como efetuar a análise térmica com MCNP e, portanto, esta será realizada apenas com SCALE4.4A.

3.5.1.1 Critérios de projeto

Os critérios de segurança recomendados pela IAEA (1985<sup>a</sup>, 1985<sup>b</sup>) e USNRC (2004) para criticalidade, blindagem e carga térmica são, respectivamente:

 O fator de multiplicação de nêutrons efetivo calculado usando métodos de transporte por Monte Carlo deve ser, para condições normais de operação e também sob condições de acidente, menor que 0,95. Tal condição pode ser matematicamente expressa por,

$$(k_{eff} + 2\sigma + \beta) < 0.95$$

onde  $k_{eff}$  é o fator de multiplicação de nêutrons efetivo,  $\sigma$  é o desvio padrão do  $k_{eff}$  e  $\beta$  é o *bias*. Esta condição deve ser garantida sob uma situação de moderação ótima, a qual será assumida neste texto como correspondendo ao casco totalmente inundado por água. O "bias" é assumido zero, pois, sua determinação depende da avaliação de "benchmarks" não efetuada neste trabalho.

ii. A máxima dose no ponto de maior intensidade deve ser, para a soma das taxas de dose por nêutrons e gamas, menor que 10.000 μSv/h (1 Rem/h) – taxa de dose local na superfície do casco que pode ser tocada facilmente.

iii. Para uma temperatura ambiente de 38 °C e sem correntes de ar, a temperatura máxima em qualquer superfície do casco que possa ser facilmente tocada deve ser tal que: inferior a 50 °C para carga térmica solar igual a zero; ou, inferior a 85 °C para carga térmica solar igual a 122,92 Btu/ft<sup>2</sup>.hr em um período de 12 horas.

# 3.5.1.2 Dados dos elementos combustíveis

As principais características dos dois tipos de elementos combustíveis simulados para carregamento no casco duplo propósito são mostradas nas tabelas 3.3 e 3.4 e nas figuras 2.4 e 3.7. O combustível TRIGA com revestimento de alumínio foi escolhido por constituir a maioria dos elementos do IPR – R1 e o carregamento de U235 nestes e nos elementos com revestimento de inox é praticamente o mesmo. O combustível MTR simulado não refere-se exatamente aos elementos combustíveis usados no reator IEA – R1, pois não foram conseguidos dados específicos para os elementos deste reator. Foram então utilizados os dados dos elementos combustíveis MTR de U<sub>3</sub>O<sub>8</sub>-Al usados no reator argentino RA-3 e que são similares aos utilizados no IEA – R1.

Componente	Dimensão (cm)	Material
Placas MTR	· ·	
Zona Ativa		U308-A1 ( $\rho$ =4,8 g/cm <sup>3</sup> )
Espessura	0,07	
Largura	6,0	
Altura	61,5	and the second second
Espessura do revestimento	0,04	Alumínio ( $\rho=2,7 \text{ g/cm}^3$ )
Altura das placas	65,5	
Outros	como figura 3.7	
TRIGA		
Zona Ativa		U-ZrH ( $\rho=6,29 \text{ g/cm}^3$ )
Diâmetro externo	3,73	
Altura	35,56	
Diâmetro de combustível	3,56	
Espessura do revestimento	0,076	Alumínio ( $\rho=2,7 \text{ g/cm}^3$ )
Comprimento	72,24	
Refletores Axiais	10,16	Grafite ( $\rho=1,7 \text{ g/cm}^3$ )
Outros	como figura 2.4	· · · · · ·

T-1-1-22 Dime ~		0.22
1 adela 3.3 – Dimensoes e materiais	per qui d	1

- 60

	ECs MTR (RA-3)	ECs TRIGA (IPR-R1)
Massa de U <sub>3</sub> O <sub>8</sub> (g)	1743,2	
Massa de HZr (g)	= <del></del>	2250
Massa de H (g)	**==	24,5
Massa de Urânio (g)	1475,7	188
Massa de U235 (g)	290,7	37,2
Massa de Alumínio (g)	626,1	una valo dalla tale
Enriquecimento (% massa)	19,75	19,81
Massa específica (g/cm <sup>3</sup> )	4,8	6,29

Tabela 3.4 – Composições dos combustíveis.



Figura 3.7 – Elemento combustível MTR (U<sub>3</sub>O<sub>8</sub>-Al). Dimensões em cm.

3.5.1.3 Modelamento da geometria e materiais do casco

O modelamento da geometria e materiais do casco segue as características mostradas na figura 3.8. O modelo consiste em uma estrutura com dois cilindros concêntricos feitos de aço inoxidável ANSI 304 e chumbo preenchendo o espaço entre eles. Dois tipos de cestas internas (ambas em aço inox ANSI 304) foram simuladas. Uma para

acomodar até 21 elementos MTR (figura 3.8) e outra para até 78 elementos TRIGA (figura 3.9).



Figura 3.8 – Desenho esquemático do casco mostrando a cesta para elementos MTR (dimensões em mm).



Figura 3.9 - Desenho esquemático da cesta para elementos TRIGA.

# 3.5.1.4 Blindagem

Os cálculos de blindagem com SCALE foram efetuados usando o módulo SAS2H para gerar bibliotecas de dados de queima específicas para os dois tipos de elementos combustíveis, ORIGEN-ARP para calcular os termos fonte de radiação e de calor de decaimento e o módulo SAS4 para o cálculo das taxas de dose. Em análises por Monte Carlo de uma blindagem espessa, como a do casco, técnicas de redução de variância devem ser usadas para obter resultados precisos a um custo computacional aceitável. A geração e aplicação desses parâmetros pode não ser uma tarefa trivial. SAS4 tem todo esse procedimento automatizado. A resposta é obtida em função dos fatores de conversão do fluxo de gamas e nêutrons para taxas de dose ANSI/ANS-6.1.1, de 1977.

A avaliação com MCNP usa o mesmo termo fonte de radiação calculado com SAS2H e ORIGEN-ARP. Apenas no cálculo de transporte dos fótons e nêutrons é que SAS4 é substituído pelo MCNP. Como mostra a figura 3.8 o casco deve conter furos através da blindagem. No caso, um furo na tampa projetado para pressurização com gás inerte e um outro furo para drenagem de água que corre através do fundo do casco e pela parede lateral inferior. Esses furos podem acarretar elevação das taxas de dose em torno deles. Uma solução amplamente adotada para evitar esses pontos quentes é efetuar as penetrações em curva, "entortando" os tubos, conseqüentemente quebrando o caminho livre para a radiação. A avaliação dos efeitos desses furos traz grandes complicações para os cálculos de blindagem e uma avaliação detalhada dessa influência somente pôde ser realizada com o MCNP. A metodologia usada para redução de variância no módulo SAS4 é bastante eficiente para cascos cilíndricos, entretanto, ela tem limitações. Uma delas é exatamente a avaliação de partículas fluindo através de vazios. Além disto, existem limitações na modelagem geométrica.

Será também estimada a espessura mínima de blindagem, ou seja, uma espessura mínima de chumbo (espessa o suficiente para reduzir as taxas de dose abaixo do critério de blindagem) que deve sempre existir entre um segmento de tubo vazio e a superfície externa do casco (ver figura 3.10). Esta é uma abordagem que simplifica a análise de blindagem contendo vazios, porém é fortemente conservativa e penaliza o projeto. A análise detalhada com MCNP permite quantificar esse aumento de custo da abordagem pela espessura mínima de blindagem.

A cavidade do casco, que contém os elementos combustíveis, tem 30,8 cm de raio e 94 cm de altura. Nenhum vazio radial é assumido no modelo. Entretanto, axialmente a zona ativa dos elementos tem 61,5 cm e 38,1 cm de altura, respectivamente para os combustíveis MTR e TRIGA e são simuladas posicionadas no centro do casco. Assim, o modelo assume duas zonas axiais vazias igualmente espaçadas no fundo e no topo da cavidade (a ativação dos componentes de alumínio nas extremidades dos combustíveis é desprezível). Importante ressaltar que a zona ativa deve ser mantida tão simetricamente próxima do plano axial central do casco quanto possível a fim de manter a simetria axial das taxas de dose, uma vez que, o "fator quadrado da distância" não é desprezível e pode acarretar maiores doses na tampa ou no fundo do casco se a zona ativa estiver mais próxima de um ou de outro. O material da fonte de radiação é modelado com um terço da densidade do combustível e a concentração de metal pesado (Urânio) é reduzida pelo mesmo fator a

73

fim de, conservativamente, diminuir a auto-blindagem pelo próprio material que preenche a zona fonte.



Figura 3.10 – Esquema da espessura mínima de chumbo nas penetrações.

### 3.5.1.5 Criticalidade

O principal objetivo da análise de segurança quanto à criticalidade para o casco duplo propósito é garantir que o combustível nuclear dentro do casco será mantido subcrítico sob condições normais de operação e também sob condições hipotéticas de acidente. A contenção do casco, portanto, deve ser capaz de impedir infiltrações de água dentro da cavidade. Essa condição de estanqueidade deve ser observada em condições normais de operação, assim como após os testes tipo B (NETO e MOURÃO, 2002) a que o casco deve ser submetido.

Os cálculos de criticalidade foram realizados com MCNP4B e SCALE/KENO-VI. Em todos os cálculos foi considerado que todos os elementos combustíveis são frescos. Esta é uma hipótese conservativa, pois, tal situação, definitivamente não se configura o padrão para um casco que se propõe trabalhar com elementos combustíveis gastos. As massas de material fissil nos elementos frescos foram informadas pelos operadores dos reatores e fabricantes dos combustíveis. Também, conservativamente, nenhum envenenamento é considerado e em particular para os elementos TRIGA os discos com veneno queimável de samário são desconsiderados.

Os cálculos com MCNP também usaram dados nucleares da ENDF/B-VI ou ENDF/B-V, temperatura de 23° Celsius sem nenhuma correção e opção de fonte *KCODE*. O modelo representa cada um dos elementos inseridos na cesta.

Quatro condições de moderação foram simuladas. A primeira, corresponde à condição normal de operação, na qual o casco encontra-se seco e apenas ar envolve os elementos combustíveis dentro da cavidade. As outras três constituem condições de acidente nas quais o casco encontra-se totalmente inundado por água, sendo uma situação correspondendo apenas à inundação da cavidade, outra para a cavidade inundada e todo o casco envolto por uma camada com 30 cm de espessura de água e a terceira condição, simulada apenas para os elementos MTR, em que as dimensões das células da cesta são reduzidas de 10,0 cm x 10,0 cm para 8,7 cm x 8,7 cm a fim de simular a situação hipotética da cesta ser danificada e todos os 21 elementos serem comprimidos com a separação entre eles sendo unicamente devido à espessura das chapas de aço da cesta.

### 3.5.1.6 Térmica – calor de decaimento

O módulo HTAS1 (Heat Transfer Analysis Sequence) do SCALE foi utilizado na análise térmica do casco. Este módulo de controle gera o "input" necessário para o código HEATING7.2 e automaticamente o manipula para efetuar a análise térmica bidimensional (R-Z). O modelo inclui múltiplos materiais que podem sofrer mudança de fase e suas propriedades térmicas são fornecidas pela biblioteca de materiais do programa. A condutividade térmica, densidade e calor específico de cada material são função da temperatura. As condições de contorno, as quais podem ser superficie-superficie ou superfície-ambiente, podem ser temperatura fixa ou qualquer combinação de fluxo de calor, convecções forçada ou natural e radiação. Três técnicas para solução de problemas permanentes estão disponíveis no programa, porém apenas o Método Iterativo de Sobrerelaxações Sucessivas com Extrapolação foi utilizado. Os transientes podem ser resolvidos usando vários dos esquemas de diferenças finitas. Na simulação adota-se o Procedimento Clássico Explícito.

75

Apenas as condições normais de operação/transporte, conforme especificadas em USNRC (2004), em que o calor de decaimento do combustível irradiado representa uma fonte de calor mensurável foram avaliadas. As condições de acidente, nas quais os dispositivos são submetidos a situações de incêndio fogem ao escopo dessa avaliação do calor residual.

# 3.5.2 Poços - Estocagem Úmida, TRIGA

O sistema originalmente projetado para o armazenamento temporário dos combustíveis gastos do IPR – R1 é constituído por doze poços de estocagem. Localizados ao lado do poço do reator, esses poços são cilindros de aço, encamisados por alumínio e enterrados no solo cheios de água. Cada um comporta um "rack" com capacidade para seis elementos combustíveis TRIGA. Construídos na década de 1960, juntamente com o reator, não foram encontrados no CDTN quaisquer registros de análises de criticalidade, de blindagem e de remoção do calor residual efetuadas para esses poços. Os mesmos módulos de SCALE e MCNP empregados na avaliação do casco duplo propósito são usados também para os poços.

A distância mínima, centro a centro, entre cada poço é de 95 cm. A profundidade de cada poço é de 304 cm e o diâmetro interno atinge 23,5 cm. O "rack" de elementos combustíveis é colocado no fundo do poço. O modelamento da geometria e materiais dos poços e "racks" segue as características mostradas nas figuras 3.11 e 3.12. Não foram encontradas informações sobre o tipo de aço e de alumínio utilizados nas paredes dos poços. Nas simulações são assumidos aço inoxidável ANSI 304 e alumínio metálico.

Os critérios de segurança quanto à criticalidade, blindagem e carga térmica para os poços podem ser os mesmos adotados para o casco duplo propósito. Entretanto, como os poços de armazenamento situam-se na sala do reator, local onde a presença de pessoas é bastante freqüente, provavelmente o limite de taxa de dose a ser observado deva ser o de dose efetiva para trabalhadores (ocupacional) que segundo ICRP (1990) é de 10  $\mu$ Sv/h (20mSv/ano, 2000 h/ano).

76



Figura 3.11 – Poço de estocagem de elementos combustíveis gastos do IPR – R1 (dimensões em mm).



Figura 3.12 – "Rack" de estocagem de elementos combustíveis gastos do IPR – R1 (dimensões em mm).

# 3.5.2.1 Blindagem

A simulação da blindagem considera o "rack" com os seis elementos combustíveis TRIGA no fundo do poço coberto por diferentes espessuras de água. O material da fonte é novamente modelado com um terço da densidade do combustível e da concentração de metal pesado.

# 3.5.2.2 Criticalidade

Também a exemplo do casco os elementos combustíveis são simulados frescos e sem nenhum envenenamento. Uma única condição de moderação foi simulada e corresponde à condição normal de operação, na qual, o poço encontra-se inundado por água.

# 3.5.2.3 Térmica - calor de decaimento

O módulo HTAS1 foi utilizado também na análise térmica dos poços e considerou-se a condição normal de operação com temperatura ambiente de 38 °C, sem correntes de ar e carga térmica solar igual a zero.

# CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E ANÁLISE

Neste capítulo são apresentados e analisados os resultados obtidos na implantação, validação da metodologia de cálculo e simulação do reator IPR – R1. Inicialmente, são mostrados os resultados obtidos com o processamento paralelo do MCNP no "cluster" de microcomputadores. Em seguida a validação da metodologia de simulação, os resultados para o IPR – R1 e o estudo da estocagem dos elementos combustíveis gastos no casco duplo propósito e nos poços.

#### 4.1 MCNP4B e o Processamento Paralelo em um Cluster Linux

A versão 4B do MCNP dispõe de funções do PVM inseridas em seu código fonte. O "cluster" construído a fim de analisar os ganhos proporcionados pelo PVM conta com três antigos microcomputadores PENTIUM II de 266 MHz que encontravam-se subutilizados devido à sua obsolescência, e portanto puderam compor o cluster dedicado às simulações por Monte Carlo. A forte escassez de recursos financeiros constituíram uma barreira, até o momento intransponível, à aquisição de equipamentos modernos que permitissem construir um "cluster" em sintonia com a tecnologia de microcomputadores atual. Considera-se, entretanto, que é de extremo valor dominar e utilizar essa tecnologia apesar da obsolescência conjuntural dos equipamentos. Detalhes de montagem e configuração do "cluster", além de procedimentos de compilação para produzir o executável paralelizado do MCNP4B podem ser encontrados em DALLE e MUNIZ (2002).

O desempenho do sistema foi verificado empregando uma das entradas de dados do MCNP4B desenvolvidas para modelar o reator IPR – R1. Esse modelo foi executado com várias combinações de números de histórias e ciclos, compiladores, sistemas operacionais, número de processadores e formatos das bibliotecas de dados. Executáveis do MCNP4B foram gerados para Linux e Windows usando diferentes compiladores Fortran: Lahey5 para Windows e GNU g77, versões 0.5.22 e 0.5.26, para Linux. Para Windows somente um executável seqüencial foi gerado, enquanto que para Linux foram produzidas versões seqüenciais e paralelas. Para um único processador a execução pela versão seqüencial é mais eficiente que para a versão paralela sendo o tempo de execução até 13% menor. Este efeito pode ser atribuído à inexistência dos parâmetros específicos do PVM no

81

#### CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E ANÁLISE

executável seqüencial, tornando-o mais "limpo". A utilização de bibliotecas de dados em formato binário levou a uma redução de  $\approx 2\%$  no tempo de processamento dos casos simulados. Essa diferença tende a aumentar para simulações que exijam maior utilização de dados de seções de choque.

A tabela 4.1 resume os resultados dos testes efetuados no sistema, os quais, também podem ser visualizados na figura 4.1. Percebe-se que o compilador g77, versão 0.5.26, produz o executável de melhor desempenho, seguido pelo Lahey5 e por último a versão 0.5.22. Chama atenção a piora de desempenho verificada na execução com dois computadores em relação à com um. Essas perdas podem ser parcialmente atribuídas às funções do PVM inseridas na versão paralela e que não existem na versão seqüencial para um processador. Por outro lado, ao empregar três computadores o resultado é claramente favorável. Para compilador g77-0.5.26 os tempos de processamento usando 1 e 2 computadores, são respectivamente, 37% e 50% maiores que aqueles obtidos para 3 processadores. A condição ótima, dentre as opções comparadas, favorece a execução em paralelo usando 3 microcomputadores, com MCNP compilado com g77-0.5.26 e bibliotecas de dados em formato binário. Esta condição possibilita uma otimização superior a 140% em relação à pior situação.

Sistema	# de	# de ciclos	Tempo	Diferença para
operacional /	computadores	х	(horas)	o melhor tempo
Compilador		# de histórias		(%)
Linux / g77-	1	550.000	5,31	141,4
0.5.22		4.000.000	37,58	137,8
Win98 /	1	550,000	3,49	58,6
Lahey5		4.000,000	25,34	60,4
Linux / g77-	1	550.000	3,02	37,3
0.5.26		4.000.000	21,67	37,2
Linux / g77-	2	550.000	5,29	140,5
0.5.22		4.000.000	38,65	144,6
Linux / g77-	2	550.000	3,28	49,1
0,5.26		4.000.000	23,84	50,9
Linux / g77-	3	550.000	3,15	43,2
0.5.22		4,000,000	21,30	34,8
Linux / g77-	3	550.000	2,20	0,0
0.5.26		4.000.000	15,80	0,0

Tabela 4.1 - Resultados dos testes de desempenho.



Figura 4.1 – Resultados dos testes de desempenho.

#### 4.2 A Validação do MONTEBURNS

#### 4.2.1 Cálculo do $k_{eff}$ de Reatores TRIGA

Os experimentos "benchmark" de criticalidade do "TRIGA de Ljubljana" foram simulados com MONTEBURNS. Os valores do fator de multiplicação de nêutrons efetivo,  $k_{eff}$ , de cada um dos quatro núcleos foi calculado. Na análise de queima foi assumida a hipótese de que não houve remanejamento de elementos combustíveis durante a irradiação, isto é, simulou-se a irradiação contínua e constante a 250 kW do núcleo 133 desde 0,0 MWd até 1,22 MWd e do núcleo 134 de 0,0 MWd até 1,15 MWd. A irradiação total para cada núcleo foi dividida em duas etapas de queima seguida por uma etapa de decaimento, por 10 dias, apenas para remoção do envenenamento por produtos de fissão. O tempo de processamento de uma execução completa do MONTEBURNS para cada núcleo simulado, na qual o MCNP é executado seis vezes, atinge aproximadamente 66 horas em um computador Pentium III de 1000 MHz.

Os resultados dos cálculos de  $k_{eff}$  são apresentados na tabela 4.2 e também mostrados graficamente nas figuras 4.2 e 4.3. Percebe-se pela figura 4.3 (núcleo 134) que a diferença entre os  $k_{eff}$  medidos e calculados é aproximadamente constante e em torno de 300 pcm durante todo o intervalo de queima considerado. Por outro lado, a figura 4.2 mostra que para o núcleo 133 essa diferença é muito pequena para o núcleo fresco e aumenta para o núcleo queimado. Este comportamento pode refletir os maiores erros experimentais nas medições realizadas com o reator operando longe da criticalidade.

As diferenças entre os valores de  $k_{eff}$  calculados e aqueles medidos estão abaixo dos 500 pcm da precisão estimada para o modelo MCNP. A criticalidade de reatores TRIGA parece, portanto, ser adequadamente representada por MONTEBURNS tanto para condições de início de vida quanto para o combustível irradiado. Para validar também cálculos de composições isotópicas de combustível irradiado foi simulado o experimento de irradiação do elemento combustível MTR no reator de pesquisas RA-3 e os resultados são apresentados na seção a seguir.

Núcleo	Queima (MWd)	$k_{eff} \pm \sigma$ (experimental)	$k_{eff} \pm \sigma$ (calculado)	$k_{eff}$ (calc.) – $k_{eff}$ (exp.)
133	0	1,00277 ± 0,00015	1,00337 ± 0,00036	0,00060
133.1	1,22	0,9842 ± 0,00160	0,98836± 0,00035	0,00416
134	0	1,0202 ± 0,00200	1,02297 ± 0,00035	0,00277
134.1	1,15	1,00460 ± 0,00015	1,00761 ± 0,00035	0,00301

Tabela 4.2 – Valores de  $k_{eff}$  medidos e calculados para os núcleos 133 e 134 com combustível fresco e irradiado.



Figura 4.2 –  $k_{eff}$  medidos e calculados para o núcleo 133.



Figura 4.3 –  $k_{eff}$  medidos e calculados para o núcleo 134.

4.2.2 Simulação da Queima de U235 em Placas de um Elemento MTR com Combustível U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al Irradiado

As duas placas do elemento combustível MTR irradiado no reator RA-3 e depois desmantelado foram avaliadas quanto à queima inicialmente por varredura gama e em seguida por análise química destrutiva. O espectro gama foi obtido a intervalos de 1 cm ao longo das linhas central axial e central transversal de ambas as placas. Os principais picos encontrados foram, em ordem decrescente de intensidade, para Cs137, Ce144, Pr144 e Cs134. O perfil de atividade do Cs137 constituiu o melhor perfil de depleção do U235 na placa combustível e foi, portanto, o principal guia para a seleção das posições onde seriam furadas as placas para retirada das amostras para análise química de queima. Sete amostras de 4x4 mm cada equidistantes umas das outras ao longo da linha central axial e uma amostra na linha central transversal próximo à borda da parte ativa das placas (ver figura 4.4) foram cortadas usando um punção hidráulico manual. Essas oito amostras fornecem uma distribuição pontual da queima do U235 ao longo das placas.



Figura 4.4 – Posições de retirada das amostras para análise química de queima.

A tabela 4.3 mostra os valores da distribuição de queima (%U235) em ambas as placas e na figura 4.5 esses valores são "plotados". Os resultados revelam uma queima mais alta na placa externa ( $N^2$  19) e também maior na borda da parte ativa do que no centro. Essas variações mostram a influência da distribuição do fluxo de nêutrons térmicos no combustível do reator RA-3. A transformação de resultados pontuais para um resultado de queima média em toda a placa foi feita por ponderação geométrica considerando os pontos amostrados como o centro de cada segmento (peso=comprimento do segmento) e o peso total da ponderação igual ao comprimento da placa. Esta ponderação diminui a precisão dos resultados e produz valores médios de 18% e 22% de queima de U235 para as placas

interna e externa, respectivamente. Devido ao número de amostras retiradas das placas ser relativamente pequeno nenhuma estimativa da precisão da ponderação foi efetuada.

Tabela 4.3 – Distribuição de queima (espectrometria de massa) para as placas N<sup> $\circ$ </sup> 9 (interna) e N<sup> $\circ$ </sup> 19 (externa). O enriquecimento inicial do combustível era 19,75%. A queima média foi estimada incluindo o efeito da termalização na borda do combustível.

		Plac	a № 9	
	Linha C	entral	Borc	la
Posição Axial	Comp. Isotópica	Queima	Comp. Isotópica	Queima
(cm p/ topo)	U235 (wt.%)	(% U235)	U235 (wt.%)	(% U235)
7	17,22	12,81	······································	
15	16,24	17,77		
23	15,63	20,86		
31	15,54	21,32	14,71	25,52
39	15,66	20,71		
47	16,21	17,92		
55	17,29	12,46		
Média				18
**************************************		Plac	a Nº 19	
	Linha C	Central	Bord	la
Posição Axial	Comp. Isotópica	Queima	Comp. Isotópica	Queima
(cm p/ topo)	U235 (wt.%)	(% U235)	U235 (wt.%)	(% U235)
7	16,52	16,35		
15	15,53	21,37		
23	14,87	24,71		
31	14,61	26,03	13,89	29,67
39	14,83	24,91		
47	15,49	21,57		
55	16,66	15,65		
Média				22



Figura 4.5 – Distribuição de queima para as placas  $N^2$  9 (interna) e  $N^2$  19 (externa).

A simulação da irradiação do elemento combustível MTR seguiu o padrão adotado em todos os cálculos com MONTEBURNS. Temperatura de 23 °Celsius sem correções nas seções de choque, dados da ENDF/B-VI e ENDF/B-V, fonte de criticalidade, *KCODE*, do MCNP e biblioteca *Thermal.lib* como a fonte inicial das seções de choque na primeira execução do ORIGEN2.1. Os nuclídeos Xe135, Sm149, Sm151, Pu239, Nd143, U236, Pm147, Rh103, Xe131, Cs133, Tc99, Nd145 e Pu240 foram explicitamente listados para geração das seções de choque. Além destes, quaisquer outros com densidade atômica ou cuja contribuição para as reações de absorção ou de fissão excede 10<sup>-4</sup>.

O intervalo total de irradiação do elemento de teste atingiu 299,91 dias. Nas simulações este intervalo foi dividido em três etapas de queima distintas. A primeira totalizando 93,35 dias de queima com o elemento combustível sendo irradiado na posição I2 do núcleo do reator RA-3. Posteriormente, o elemento foi deslocado para a posição I3 e submetido a 161,58 dias de irradiação. A terceira etapa de queima teve duração de 44,98 dias com o elemento na posição F6. Uma quarta e última etapa consistiu em um período para decaimento de 5,0 anos. Admitiu-se a hipótese de que a queima zero do elemento de teste correspondeu ao início de vida do núcleo, ou seja, todos os elementos foram considerados frescos no início da simulação. Nenhum "shuffling" de elementos combustíveis foi considerado, exceto as mudanças de posições do elemento de teste de I2

para I3 e para F6. Foi considerada irradiação contínua e constante a 5MW térmicos durante todas as etapas de queima.

Os resultados da simulação são mostrados na tabela 4.4. Ela apresenta a massa de U235 calculada antes e após a irradiação para as duas placas, bem como a porcentagem de queima deste isótopo. A comparação desses valores com os valores médios de queima apresentados na tabela 4.3 mostram diferenças de 5,6% e 5,9% entre os valores calculados e medidos para as placas N<sup>o</sup> 9 e N<sup>o</sup> 19, respectivamente. A queima calculada para todas as 19 placas do elemento combustível também é mostrada na tabela 4.4, porém, neste caso, não existem resultados experimentais que permitam a comparação.

Massa inicial de Massa de U235 após Oueima U235 (gramas) irradiação (gramas) (%U235) Placa Nº 9 17,91 14,5 19,0 Placa Nº 19 17,91 14,2 20,7 Total no elemento 340,29 273,83 19,5 (19 placas)

Tabela 4.4 - Queima média calculada (MONTEBURNS).

A simulação mostra ainda (veja figura 4.6) que após cinco anos de decaimento a atividade no elemento combustível tem fortes contribuições dos produtos de fissão Cs134, Cs137 e Pm147. Já foi mencionado que dois destes, Cs134 e Cs137, constam dentre os principais picos detectados nos experimentos de varredura gama. Os outros dois principais picos detectados nos experimentos, Ce144 e Pr144, não foram registrados nos cálculos porque não estão disponíveis nas bibliotecas de dados padrão do MCNP.



Figura 4.6 - Atividade de nuclídeos no elemento MTR após 5 anos de decaimento.

# 4.3 A Simulação do Reator TRIGA IPR - R1

Um dos parâmetros calculados nas simulações com MONTEBURNS é o fator de multiplicação de nêutrons efetivo. Entretanto, a variação relativa deste, chamada reatividade, é geralmente mais utilizada na área de reatores que o fator de multiplicação em si e neste texto será definido o *excesso de reatividade* do núcleo,  $\rho$ , por,

$$\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}} \tag{4.1}$$

sendo  $k_{eff}$  o fator de multiplicação de nêutrons efetivo do núcleo com todas as barras de controle inteiramente retiradas. Define-se também a *reatividade das barras de controle* por,

$$\Delta \rho = \frac{1}{(k_{eff1})} - \frac{1}{(k_{eff2})}$$
(4.2)

onde  $k_{eff1}$  e  $k_{eff2}$  são os fatores de multiplicação de nêutrons efetivos do núcleo com a barra de controle em questão inteiramente inserida e inteiramente retirada.

A margem de desligamento é dada pela diferença entre a soma da reatividade de todas as barras de controle, exceto a barra mais reativa, e o excesso de reatividade.

4.3.1 Início de Vida e Núcleos Subseqüentes

A simulação do IPR – R1 considerou a evolução do reator segundo o histórico de queima e decaimento descrito no capítulo 3. Portanto, foram calculadas reatividades para o núcleo BOL e para todas as ocasiões em que houve alteração no número de elementos combustíveis no núcleo.

## 4.3.1.1 O veneno queimável

A ausência de dados precisos sobre geometria e composição dos discos de veneno queimável presentes nos elementos combustíveis com revestimento de alumínio constituem um fator de incerteza nas simulações. A informação mais confiável diz apenas que os discos são manufaturados via técnicas de metalurgia do pó utilizando alumínio e tri-óxido de samário (Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) e que eles são responsáveis por inserir uma reatividade negativa um pouco superior a 1% Δk/k (1000 pcm) em um núcleo fresco e ligeiramente supercrítico. Até o momento são desconhecidos os valores dos diâmetros interno (os discos têm um furo no centro) e externo (supõe-se que seja da ordem do diâmetro ativo do combustível) dos discos. Também não há dados sobre a composição isotópica exata da liga ou sequer sua densidade. A abordagem adotada para contornar essa importante lacuna de dados sobre o veneno queimável consistiu em simular, em um primeiro momento, o núcleo BOL com os discos sendo constituídos apenas por alumínio. Seguiram-se simulações em que os discos eram constituídos por 10%, 5% e 1% de tri-óxido de samário (admitiu-se a abundância natural do samário) e o restante, alumínio. A composição com 1% de Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub> e 99% de alumínio apresentou uma redução de 1010 pcm no excesso de reatividade quando comparado ao núcleo com 100% de alumínio nos discos. Esse valor de reatividade é compatível com aquele informado em GA (1958ª) e, portanto, assumiu-se essa composição para o veneno queimável no núcleo BOL.

A tabela 4.5 apresenta os valores de  $k_{eff}$  para as simulações do núcleo BOL com os diferentes teores de samário e o valor de reatividade negativa introduzido em relação ao núcleo com 0% de veneno queimável. Estes mesmos resultados são plotados nas figuras 4.7 e 4.8.

Teor de Sm <sub>2</sub> O <sub>3</sub> na liga	$k_{e\!f\!f}\pm\sigma$	ho
Sm <sub>2</sub> O <sub>3</sub> -Al (%)		(pcm)
10	0,99313 ±	-2797
	0,00051	
5	0,9975 ±	-2356
	0,00052	
1	$1,01108 \pm$	-1010
	0,00050	
0	$1,02151 \pm$	0
	0,00052	

Tabela 4.5 - Reatividades inseridas pelos discos de veneno queimável - 0 MWh, 56 EC.



Figura 4.7 – Influência do teor de Samário no  $k_{eff}$  – núcleo 0 MWh, 56 EC.



Figura 4.8 - Reatividade inserida pelo veneno queimável - núcleo 0 MWh, 56 EC.

A simulação de evolução, partindo do núcleo BOL com 1% de Sm<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, mostra que a irradiação dos discos reduz o efeito do veneno queimável sobre a reatividade de 1010 pcm para 50 pcm (~ 1 $\sigma$ ) no núcleo com 1604 MWh de queima. A partir deste ponto tornase, portanto, desnecessário continuar a simular a irradiação do veneno queimável, pois alterações de reatividade da ordem do desvio padrão do cálculo torna-o inconclusivo. Na verdade foram observadas alterações de até  $3\sigma$  em cálculos de  $k_{eff}$  com MCNP simplesmente devido a diferenças de sistema operacional, compiladores ou a alterações insignificantes no modelo de cálculo. Portanto, pode-se admitir conservativamente que variações em reatividade de até  $3\sigma$  são inconclusivas e podem ser atribuídas à mera flutuação estatística do método Monte Carlo. Tal fato fica bem evidente ao se verificar a oscilação para o núcleo com 1801 MWh, no qual a variação de reatividade torna-se ligeiramente superior àquela observada em 1604 MWh (na verdade o núcleo a 1801 MWh conta, diferentemente dos outros, com elementos combustíveis com revestimento em inox, o que também pode explicar uma maior oscilação ao mesmo tempo em que comprova que ao se atingir este nível de queima o efeito do veneno queimável torna-se irrelevante). A tabela 4.6 mostra as alterações na densidade atômica média do isótopo 149 do samário (o mais importante do ponto de vista neutrônico, graças à sua grande seção de choque de absorção) nos discos de veneno queimável em função da queima e o seu efeito sobre a reatividade. Esta alteração de reatividade devida ao veneno queimável em função da queima é visualizada na figura 4.9.

Queima (MWh)	Densidade atômica do Sm149 nos discos (x10 <sup>-5</sup> átomos/barn.cm)	$\Delta \rho$ (pcm)
0	1,5067	1010
149	1,0926	856
180	1,0197	702
380	0,6345	383
1604	0,0179	50
1801	0,0099	81

Tabela 4.6 - Evolução do Samário-149 nos discos de veneno queimável.


Figura 4.9 - Reatividade inserida pelo veneno queimável em função da queima.

### 4.3.1.2 Excesso de reatividade e reatividade de barras de controle

As tabelas 4.7 a 4.14 mostram os valores calculados de excesso de reatividade nas ocasiões em que ocorreram as mudanças de configuração no núcleo do IPR – R1. A figura 4.10 plota esses valores em função da energia dissipada. Também foram calculadas as reatividades das três barras de controle (no caso das pequenas alterações de núcleo que não afetam sensivelmente a reatividade das barras esses resultados foram omitidos das tabelas). Para o núcleo com 59 elementos combustíveis e dissipação de 1604 MWh de energia térmica (tabela 4.12) foram calculados também os valores de reatividade de alguns elementos combustíveis.

	k <sub>eff</sub>	ρ (pcm)
Excesso de reatividade do núcleo	$1,01008^* \pm 0,00048$	998
Reatividade da Reguladora	$1,00556 \pm 0,00049$	445
Reatividade da Controle	$0,99280 \pm 0,00049$	-1723
Reatividade da Segurança	0,99311 ± 0,00051	-1692

Tabela 4.7 - Reatividades calculadas a 0 MWh - núcleo BOL, 56 EC.

<sup>\*</sup>A diferença de 0,00100 entre este valor e aquele apresentado na tabela 4.5 deve-se à inserção do tubo pneumático nesta simulação. O tubo foi retirado a partir de 1604 MWh.

	$k_{eff}$	ho
		(pcm)
Núcleo com 56 EC	$1,00763 \pm 0,00050$	757
Núcleo com 57 EC	$1,01169 \pm 0,00050$	1155

Tabela 4.8 – Excessos de reatividade calculados a 149 MWh.

Tabela 4.9 – Excessos de reatividade calculados a 180 MWh, 57 EC.

	k <sub>eff</sub>	$\rho$ (pcm)
Núcleo com EC 1137 (antes da troca)	$1,01052 \pm 0,00053$	1041
Núcleo com EC 1147 (após a troca)	1,01183 ± 0,00050	1169

Tabela 4.10 - Excessos de reatividade calculados a 380 MWh.

	k <sub>eff</sub>	ρ
		(pcm)
Núcleo com 57 EC	$1,01080 \pm 0,00048$	1068
Núcleo com 58 EC	$1,01455 \pm 0,00047$	1434

Tabela 4.11 – Excessos de reatividade calculado a 1604 MWh.

	k <sub>eff</sub>	ρ
		(pcm)
Núcleo com 58 EC	$1,00656 \pm 0,00050$	652

	k <sub>eff</sub>	ρ
		(pcm)
Excesso de reatividade do núcleo	$1,01065 \pm 0,00050$	1054
Reatividade da Reguladora	$1,00752 \pm 0,00050$	-307
Reatividade da Controle	0,99416 ± 0,00053	-1641
Reatividade da Segurança	0,99458 ± 0,00050	-1599
Reatividade do EC em B5	$0,99761 \pm 0,00053$	1293
Reatividade do EC em C9	$1,00228 \pm 0,00052$	826
Reatividade do EC em D13	$1,00478 \pm 0,00048$	578
Reatividade do EC em E17	$1,00523 \pm 0,00049$	533
Reatividade do EC 1137 em B5	$1,01150 \pm 0,00049$	1376
Reatividade do EC 1137 em C9	1,01072 ± 0,00048	833
Reatividade de EC fresco (inox) em B5	$1,01150 \pm 0,00048$	1376
Reatividade de EC fresco (inox) em C9	1,00985 ± 0,00052	748

Tabela 4.12 - Reatividades calculadas a 1604 MWh, 59 EC.

Tabela 4.13 - Reatividades calculadas a 1801 MWh, 59 EC.

	<b>k</b> <sub>eff</sub>	ρ (pcm)
Excesso de reatividade do núcleo	$1,00952 \pm 0,00050$	943
Reatividade da Reguladora	$1,00652 \pm 0,00047$	-295
Reatividade da Controle	0,99316±0,00051	-1632
Reatividade da Segurança	0,99332 ± 0,00050	-1616

Tabela 4.14 - Reatividades calculadas a 1801 MWh, 63 EC, barras no anel C.

	$k_{eff}$	$\rho$
Excesso de reatividade do núcleo	$1.01928 \pm 0.00047$	1892
Reatividade da Reguladora	$1,01624 \pm 0,00049$	-293
Reatividade da Controle	0,99593 ± 0,00050	-2300
Reatividade da Segurança	0,99649 ± 0,00047	-2244



Figura 4.10 - Histórico do excesso de reatividade em função da queima.

#### 4.3.1.3 Comparações com resultados experimentais e com cálculos por difusão

As reatividades medidas por ocasião das modificações nas configurações de núcleo do reator são utilizadas para comparação com os resultados calculados. Esses resultados experimentais foram levantados em diversas publicações, relatórios internos e livros de operação do reator pesquisados na biblioteca do CDTN (LIMA e ANDRADE, 1969; LIMA e ANDRADE, 1970; SILVA, 1971; RODRIGUES, 1972; POLASTRO, 1980; GUIMARÃES, 1985; PAIANO e RESENDE, 1995<sup>a</sup>; PAIANO e RESENDE, 1995<sup>b</sup>; SOUZA e RESENDE, 1996; SOUZA e RESENDE, 1997; CDTN, 1998<sup>a</sup>; CDTN, 1998<sup>b</sup>; CDTN, 2000; SOUZA et al, 2001). Além de resultados experimentais, alguns valores calculados por DALLE (1999, 2002, 2003) usando códigos de difusão também são comparados. As tabelas 4.15 e 4.16 apresentam os valores medidos e os calculados por difusão, a dois grupos de energia, do excesso de reatividade e reatividade das barras de controle. Nas tabelas 4.18 e 4.19 podem ser vistos os valores de reatividade dos elementos combustíveis medidos em 1996 por ocasião da inserção do 59<sup>e</sup> elemento no núcleo e os calculados por difusão. As figuras 4.11 e 4.12 mostram os valores calculados com MONTEBURNS, por difusão e os experimentais do excesso de reatividade e a reatividade

dos elementos combustíveis. As tabelas 4.17 e 4.20 listam todos esses valores com as diferenças entre MONTEBURNS/experimento e difusão/experimento.

Configuração	$\rho$ excesso (pcm)	$\rho$ Controle (pcm)	$\rho$ Segurança (pcm)	$\rho$ Reguladora (pcm)
0 MWh, 56 EC	1019	-1841	-1675	-379
149 MWh, 56 EC	750	nd	nd	nd
149 MWh, 57 EC	1296	nd	nd	nd
180 MWh, EC 1137	1122	nd	nd	nd
180 MWh, EC 1147	1177	nd	nd	nd
380 MWh, 57 EC	nd	nd	nd	nd
380 MWh, 58 EC	1541	nd	nd	nd
1604 MWh, 58 EC	751	nd	nd	nd
1604 MWh, 59 EC	1059	-1801	-1620	-363
1801 MWh, 59 EC	1019	nd	nd	nd
1801 MWh, 63 EC	1825	-2410		411
1				

Tabela 4.15 – Reatividades medidas.

nd = não disponível

Tabela 4.16 - Reatividades calculadas por difusão.

Configuração	k <sub>eff</sub>	$\rho$ excesso	$\rho$ Controle	$\rho$ Segurança	$\rho$ Reguladora
		(pcm)	(pcm)	(pcm)	(pcm)
0 MWh, 56 EC	1,026374	2570	-1803	-1716	-407
149 MWh, 56 EC	1,022994	2248	nd	nd	nd
1604 MWh, 58 EC	1,015027	1480	nd	nd	nd
1604 MWh, 59 EC	1,018305	1798	-1719	-1663	-402
1801 MWh, 63 EC	1,025400	2477	-2509	-2339	-399
nd = não disponível					

				-		
MWh	0	149	180	380	1604	1801
# de ECs	56	56/57	EC1137/1147	57/58	58/59	59/63
Excesso						
MB	<b>998</b>	757/1155	1041/1169	1068/1434	652/1054	943/1892
Difusão	2570	2248/nd	nd	nd	1480/1798	nd/2477
Experimento	1019	750/1296	1122/1177	nd/1541	751/1059	1019/1825
MB - Exper	-21	7/141		/-107	-99/-5	-76/67
Difus - Exper	1551	1498/			729/739	/652
Reguladora						
MB	-445	nd	nd	nd	nd/307	-295/-293
Difusão	-407	nd	nd	nd	nd/402	nd/399
Experimento	-379	nd	nd	nd	nd/363	nd/411
MB - Exper	-66				/56	/118
Difus - Exper	-28				/-39	/12
Controle						
MB	-1723	nd	nd	nd	nd/1641	-1632/-2300
Difusão	-1803	nd	nd	nd	nd/1719	nd/-2509
Experimento	-1841	nd	nd	nd	nd/-1801	nd/-2410
MB - Exper	118				/160	/110
Difus - Exper	38				/82	/99
Segurança						
MB	-1692	nd	nd	nd	nd/-1599	-1616/-2244
Difusão	-1716	nd	nd	nd	nd/-1663	nd/2339
Experimento	-1675	nd	nd	nd	nd/-1620	nd/-2212
MB - Exper	-17				/21	/32
Difus - Exper	-41	atik 3100	••• •••		/43	/-127

Tabela 4.17 – Comparação entre reatividades experimental e calculadas por MONTEBURNS (MB) e por difusão.

nd = não disponível



Figura 4.11 - Histórico comparativo do excesso de reatividade em função da queima.

	$\rho$
	(pcm)
Reatividade do EC em B5	1122
Reatividade do EC em C9	798
Reatividade do EC em D13	608
Reatividade do EC em E17	545
Reatividade do EC 1137 em B5	1156
Reatividade do EC 1137 em C9	819
Reatividade de EC fresco (inox) em B5	1154
Reatividade de EC fresco (inox) em C9	861

|--|

Tabela 4.19 – Reatividade de elementos combustíveis – calculadas por difusão a 1604 MWh e 59 EC.

	$\rho$ (ncm)
Reatividade do EC em B5	945
Reatividade do EC em C9	667
Reatividade do EC em D13	524
Reatividade do EC em E17	520
Reatividade do EC 1137 em B5	1000
Reatividade do EC 1137 em C9	705
Reatividade de EC fresco (inox) em B5	974
Reatividade de EC fresco (inox) em C9	710

Tabela 4.20 – Comparação entre reatividades experimental e calculadas por MONTEBURNS (MB) e por difusão.

1604 MWh,	MB	Difusão	Experimento	MB – Exper	Difus – Exper
<u>JY EUS</u>		~ / =		~ = 4	
EC B5	1293	945	1122	171	-177
EC C9	826	667	798	28	-131
EC D13	578	524	608	-30	-84
EC E17	533	520	545	-12	-25
EC 1137 em B5	1376	1000	1156	220	-156
EC 1137 em C9	833	705	819	14	-114
EC inox em B5	1376	974	1154	222	-180
EC inox em C9	748	710	861	-113	-151



Figura 4.12 – Comparativo da reatividade dos elementos combustíveis.

Observa-se que os valores calculados por Monte Carlo apresentam-se muito próximos daqueles medidos. As diferenças entre medições e cálculos são inferiores a 150 pcm ( $\sim 3\sigma$ ) para o excesso de reatividade dos núcleos avaliados. Quanto às reatividades de barras de controle e elementos combustíveis as diferenças não ultrapassam 230 pcm. Em termos relativos, a barra Reguladora apresenta uma diferença percentual elevada entre o valor calculado e o medido, pois o desvio padrão dos cálculos não é desprezível em relação à pequena reatividade desta barra.

Por sua vez, os resultados de cálculos por difusão ao serem comparados com os valores experimentais de reatividade dos elementos combustíveis e das barras de controle também apresentam boa concordância. Contudo, o mesmo não se observa para o excesso de reatividade, o qual, mostra grandes variações em função da queima e com diferenças superiores a até 1500 pcm. Isto evidencia as imprecisões nos cálculos de  $k_{eff}$  e que são bastante comuns em simulações de pequenos reatores de pesquisa, nos quais as heterogeneidades e as grandes fugas distorcem as simplificações inerentes à análise por difusão. Como o excesso de reatividade é calculado diretamente do  $k_{eff}$  (equação 4.1) um grande erro no  $k_{eff}$  produz um grande erro no excesso de reatividade, mas não necessariamente nas reatividades de elementos combustíveis e/ou de barras de controle que por serem calculadas como variações de  $k_{eff}$  (equação 4.2) não são afetadas se os erros nos  $k_{eff}$  forem sistemáticos.

4.3.2 Núcleo Atual - Configuração com 63 Elementos Combustíveis

Nesta seção são apresentados resultados de reatividades, fluxo neutrônico e distribuição de potência no IPR – R1 calculados utilizando os parâmetros de queima e carregamento do reator observados em 06 de Novembro de 2004, ou seja, núcleo com 1892 MWh e 63 elementos combustíveis.

4.3.2.1 Reatividades

A tabela 4.21 mostra os valores de excesso de reatividade e reatividade das três barras de controle calculados com MONTEBURNS para o núcleo atual do IPR – R1.

	k <sub>eff</sub>	$\rho$ calculado
		(pcm)
Excesso de reatividade	$1,01864 \pm 0,00047$	1830
Reatividade da barra Controle	0,99574 ± 0,00049	-2258
Reatividade da barra Segurança	0,99671 ± 0,00048	-2160
Reatividade da barra Regulação	1,01559 ± 0,00048	-295

Tabela 4.21 - Reatividades calculadas a 1892 MWh e 63 EC (núcleo atual).

O efeito das interações entre as três barras de controle é mostrado na tabela 4.22. Sabe-se que quando barras de controle estão próximas, onde se faz sentir o efeito de sombreamento, a reatividade total das barras inseridas simultaneamente é menor do que a simples soma da reatividade de cada uma. O efeito inverso, anti-sombreamento, prevalece para barras posicionadas afastadas, ou seja, a reatividade das barras inseridas juntas é maior que a soma da reatividade de cada uma (LAMARSH, 1977). As simulações mostram que na configuração atual do TRIGA IPR – R1 o anti-sombreamento prevalece em todas as combinações de inserção de barras. Entretanto, para a inserção conjunta das barras de Regulação e de Segurança (que estão próximas entre si) os valores de reatividade computados nos dois modos são muito próximos (a diferença é inferior a  $1\sigma$ ) e, portanto, é possível a ocorrência de sombreamento para as barras de Segurança e Regulação.

Barras inseridas	$k_{eff}\pm\sigma$	Reatividade (pcm)	Soma de reatividades individuais (pcm)
Controle e Segurança e	0,96610 ± 0,00049	-5339	-4713
Regulação			
Controle e Segurança	0,96963 ± 0,00051	4962	4418
Controle e Regulação	$0,99022 \pm 0,00049$	-2818	-2553
Segurança e Regulação	$0,99351 \pm 0,00049$	-2483	-2455
Margem de		-653	625
desligamento	*** ***		

Tabela 4.22 – Influência da interação das barras sobre a reatividade – núcleo 63 EC e 1892 MWh.

### 4.3.2.2 Fluxo Neutrônico

Os estimadores de fluxo neutrônico do MCNP calculam os valores de fluxo obedecendo à especificação de fonte feita pelo usuário e que obviamente não corresponde à fonte de nêutrons do sistema real. Portanto, para obter os valores de fluxo reais é necessário normalizar os valores calculados pelo MCNP. Nas simulações de sistemas contendo material físsil a normalização é feita pela potência nominal, ou seja, deve-se multiplicar os valores por,

$$\frac{\nu P (10^6 W/MW)}{(1,602 \times 10^{-13} j/MeV) k_{eff} Q}$$
(4.3)

sendo v o número médio de nêutrons por fissão, P a potência nominal em MW,  $k_{eff}$  o fator de multiplicação efetivo de nêutrons e Q a energia média recuperável por fissão. Para o núcleo atual, estes valores calculados com MONTEBURNS, são:

$$v = 2,437$$
  
 $k_{eff} = 1,01864$   
 $Q = 200,06 \text{ MeV}$   
 $P = 0.250 \text{ MW}$ 

Os principais dispositivos de irradiação neutrônica do reator, o tubo central e a mesa giratória, foram simulados e a distribuição axial e a energética do fluxo de nêutrons foi determinada. No tubo central o fluxo de nêutrons foi calculado em 27 posições localizadas na coordenada de raio zero e variando axialmente de z = -25 cm a z = 25 cm,

#### CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E ANÁLISE

sendo z = 0 o centro do núcleo ativo. Para a mesa giratória foram 13 posições com coordenadas variando axialmente de z = 1 cm a z = 25 cm e radialmente fixa na posição central da mesa. A figura 4.13 mostra um corte axial do modelo MCNP utilizado, no qual estas posições podem ser visualizadas como a seqüência de pequenos traços pretos no tubo central e na mesa giratória. As tabelas 4.23 e 4.24 (plotadas nas figuras 4.14 e 4.15) apresentam a distribuição axial do fluxo neutrônico térmico e total no tubo central e na mesa giratória. Esses valores correspondem a uma energia de corte para os nêutrons térmicos igual a 0,4 eV, a qual, corresponde à energia de corte do Cádmio que é o material mais freqüentemente usado como filtro nos detectores de ativação. Axialmente podem ser observadas variações de até 3,25 vezes no valor do fluxo térmico a distâncias de apenas 25 cm do ponto de fluxo máximo no tubo central. Essa variação é bem menor na mesa giratória, 1,22 vezes. Portanto, a precisão das análises por ativação neutrônica de amostras cujo comprimento não seja desprezível, irradiadas no tubo central, pode ser fortemente afetada se nenhum fator de correção do fluxo axial for adotado.



Figura 4.13 – Vista axial do modelo MCNP do IPR – R1 mostrando as posições em que foram calculados os fluxos neutrônicos.

Posição	Fluxo térmico	Fluxo total $(\pi^2 + \pi^2 - \pi^2)$	Posição	Fluxo térmico	Fluxo total
(cm)	(neutron/cm .s)	(neutron/cm .s)	(cm)	(neutron/cm .s)	(neutron/cm .s)
-25	4,2E+12	5,7E+12	25	4,0E+12	5,6E+12
-23	5,0E+12	6,9E+12	23	4,6E+12	7,3E+12
-21	5,5E+12	9,0E+12	21	5,0E+12	8,3E+12
-19	6,0E+12	1,1E+13	19	6,4E+12	1,1E+13
-17	7,6E+12	1,4E+13	17	6,6E+12	1,3E+13
-15	8,5E+12	1,7E+13	15	7,6E+12	1,6E+13
-13	8,8E+12	1,8E+13	13	8,5E+12	1,8E+13
-11	9,9E+12	2,1E+13	11	1,0E+13	2,0E+13
9	1,1E+13	2,4E+13	9	1,1E+13	2,2E+13
-7	1,3E+13	2,5E+13	7	1,2E+13	2,4E+13
-5	1,2E+13	2,6E+13	5	1,2E+13	2,5E+13
3	1,3E+13	2,7E+13	3	1,3E+13	2,6E+13
-1	1,3E+13	2,7E+13	1	1,3E+13	2,7E+13
0	1,3E+13	2,7E+13			

Tabela 4.23 – Distribuição axial do fluxo neutrônico no tubo central – 250 kW.



Figura 4.14 – Distribuição axial do fluxo de nêutrons no tubo central.

Posição	Fluxo térmico	Fluxo total
(cm)	(nêutrons/cm <sup>2</sup> .s)	(nêutrons/cm <sup>2</sup> .s)
1	2,2E+12	3,6E+12
3	2,1E+12	3,6E+12
5	2,1E+12	3,5E+12
7	2,1E+12	3,5E+12
9	2,1E+12	3,4E+12
11	2,0E+12	3,3E+12
13	2,0E+12	3,2E+12
15	2,0E+12	3,0E+12
17	1,9E+12	2,9E+12
19	1,9E+12	2,8E+12
21	1,8E+12	2,6E+12
23	1,8E+12	2,5E+12
25	1,8E+12	2,4E+12

Tabela 4.24 - Distribuição axial do fluxo neutrônico na mesa giratória - 250 kW.



Figura 4.15 – Distribuição axial do fluxo de nêutrons na mesa giratória.

Medidas do fluxo de nêutrons para esta configuração de núcleo efetuadas por SOUZA et al (2001) usando detectores por ativação indicaram fluxos térmicos de  $8,9x10^{12}$ nêutrons/cm<sup>2</sup>.s e  $1,7x10^{12}$  nêutrons/cm<sup>2</sup>.s, respectivamente, no tubo central e na mesa giratória. Essas medições não foram realizadas com o objetivo de validação de cálculos, portanto não foi tomado nenhum cuidado com a determinação precisa da posição dos detectores, o que inviabiliza a comparação direta dos resultados da simulação com os do experimento, pois, como mostram as tabelas 4.23 e 4.24, a localização do detector tem forte influência no valor do fluxo de nêutrons.

Os cálculos de distribuição do espectro energético do fluxo neutrônico no tubo central foram realizados considerando como detector uma esfera de água com 1,5 cm de diâmetro e centrada na coordenada (0, 0, 0), enquanto que para a mesa giratória o detector utilizado foi um anel cilíndrico de ar com 1,0 cm de espessura e 1,0 cm de altura, posicionado no raio central da mesa (r = 33,4 cm) e z = 5 cm. A tabela 4.25 e a figura 4.16 mostram a distribuição energética do fluxo neutrônico nesses dois detectores. Esses valores representam os fluxos integrados por intervalo (grupos) de energia mostrado na tabela/figura e não o fluxo naquela energia específica. Percebe-se um grande número de nêutrons na faixa entre 0,01 eV e 1,0 eV na qual são encontrados os nêutrons termalizados à temperatura da água (23 °C  $\approx$  0,026 eV). O fluxo neutrônico térmico, abaixo de 0,4 eV, soma 1,3x10<sup>13</sup> nêutrons/cm<sup>2</sup>.s e representa 48% do fluxo total no tubo central. Na mesa giratória o fluxo térmico representa 61% do fluxo total, o que evidencia uma melhor termalização nessa região.

- 2		
100	The State of the second st	
N. 16	BER INTERS .	-
aler.		
8		
2		1.1
Ĩ.		1
		1965
	Charles and the second s	200
	\$ 163,2 Mark 8 💫	ŝ.
	mar has been a proved by	
		[
	EERIEM N THEM	
174		

Energia	Fluxo no tubo central	Fluxo na mesa giratória
(MeV)	(nêutrons/cm <sup>2</sup> .s)	(nêutrons/cm <sup>2</sup> .s)
1,0E-09	5,9E+09	8,4E+08
2,0E09	1,9E+10	2,0E+09
3,0E09	3,3E+10	8,7E+09
4,0E-09	6,1E+10	7,3E+09
5,0E09	5,5E+10	8,2E+09
6,0E09	6,0E+10	1,4E+10
7,0E–09	7,3E+10	1,2E+10
8,0E-09	8,0E+10	1,7E+10
9,0E09	9,4E+10	1,7E+10
1,0E-08	6,0E+11	1,0E+11
1,0E–07	9,6E+12	1,7E+12
4,0E07	2,0E+12	3,6E+11
1,0E06	5,8E+11	7,0E+10
1,0E–05	1,3E+12	1,6E+11
1,0E04	1,3E+12	1,5E+11
1,0E-03	1,3E+12	1,6E+11
1,0E-02	1,3E+12	1,7E+11
1,0E01	1,6E+12	2,1E+11
1,0E+00	3,3E+12	2,9E+11
1,0E+01	3,4E+12	2,0E+11
1,5E+01	6,9E+09	2,7E+08
Total	2,7E+13	3,6E+12

Tabela 4.25 – Espectro energético do fluxo neutrônico no tubo central e na mesa giratória – 250 kW.



Figura 4.16 – Distribuição energética do fluxo de nêutrons no tubo central e na mesa giratória.

# 4.3.2.3 Distribuição de potência

A distribuição de potência na configuração com 63 elementos combustíveis foi calculada utilizando o estimador de deposição de energia de fissão (tally F7 do MCNP). Este, inclui o aquecimento devido aos fragmentos de fissão, nêutrons e gamas de fissão cuja energia é considerada inteiramente depositada no sistema, porém, não considera a deposição de energia devido a reações outras que não as de fissão. Nesta condição a simulação apresentou o valor de 230,6 kW como sendo a potência térmica total do sistema. Este resultado é 7,7% inferior ao valor da potência nominal de 250 kW. Considerando que a precisão experimental nas medições de calibração térmica realizadas no reator situa-se em torno de 10% (SOUZA et al, 2001) o resultado calculado mostra-se satisfatório. Para normalizar a potência os valores calculados pelo MCNP foram multiplicados por,

$$\frac{vPm}{Q} \tag{4.4}$$

em que *m* é a massa, em gramas, da célula do MCNP na qual a deposição de energia está sendo estimada e os demais parâmetros são os mesmos da equação 4.3.

A tabela 4.26 mostra a potência, normalizada para o valor nominal de 250 kW, dissipada pelos elementos combustíveis (média para os elementos no mesmo anel e que tenham o mesmo histórico de irradiação) e o fator radial de potência. Como esperado, os elementos no anel B dissipam as maiores potências, sendo que os elementos em B1 e B4 são os mais "quentes", principalmente devido à melhor termalização neutrônica em torno deles graças às suas posições ao lado das barras de Controle e Segurança, as quais, durante operação são retiradas e têm seu volume no núcleo ativo preenchido pela água. Essa proximidade com o canal de água produzido com a retirada das barras de controle aumenta o fator de potência radial dos elementos em B1 e B4 em cerca de 10% em relação aos demais elementos do anel.

Posição dos	Potência média por	Total (W)	Fator de potência
Elementos	elemento (W)		radial
6 EC no anel B	5661	33966	1,43
4 EC inox no Anel C	5124	20496	1,29
6 EC Al no Anel C	5100	30600	1,29
16 EC no Anel D	3945	63120	0,99
2 EC, em D1 e D10	4372	8744	1,10
21 EC no Anel E	3269	68649	0,82
EC em E18	3403	3403	0,86
EC em E19	3492	3492	0,88
EC em E23	3449	3449	0,87
EC em F1	2893	2893	0,73
4 EC no anel F	2796	11184	0,70
Todos os 63 EC	3968	249996	

Tabela 4.26 - Distribuição de potência calculada com MCNP.

Na tabela 4.27 e na figura 4.17 são comparadas as potências médias dos elementos calculadas por MCNP com aquelas calculadas com WIMS/CITATION. Nota-se no cálculo por difusão a ligeira sobrevalorização dos elementos mais internos e uma possível sub-valorização daqueles nas posições mais exteriores. Esse resultado era esperado pois o cálculo por difusão foi realizado para licenciar o aumento de potência do reator junto ao órgão regulador e nele foram adotadas hipóteses para supervalorizar os elementos internos e assim, conservativamente, inflar o fator radial de potência nos canais "mais quentes".

Posição dos Elementos	Potência média por elemento (W) MCNP	Potência média por elemento (W) CITATION	Fator Radial MCNP	Fator Radial CITATION
6 EC no anel B	5661	5735	1,43	1,45
4 EC inox no Anel C	5124	5556	1,29	1,40
6 EC Al no Anel C	5100	4967	1,29	1,25
16 EC no Anel D	3945	3988	0,99	1,01
2 EC, em D1 e D10	4372	4355	1,10	1,10
21 EC no Anel E	3269	3220	0,82	0,81
EC em E18	3403	3277	0,86	0,83
EC em E19	3492	3338	0,88	0,84
EC em E23	3449	3333	0,87	0,84
EC em F1	2893	2671	0,73	0,67
4 EC no anel F	2796	2562	0,70	0,65
Todos os 63 EC	3968	3959		

Tabela 4.27 – Comparação da potência calculada com MCNP e por difusão.



Figura 4.17 – Comparação da potência média por elemento calculada com MCNP e por difusão.

4.3.2.4 Caracterização de queima do combustível

Para caracterizar o combustível irradiado do IPR – R1 foram selecionados alguns nuclídeos de maior interesse e calculadas suas massas, calor de decaimento, atividade e radiotoxicidades. Esses valores são mostrados na tabela 4.28 e referem-se ao combustível total nos 63 elementos combustíveis presentes no núcleo em novembro de 2004.

Nuclídeo	Massa	Atividade	Calor de	Radiotoxic.	Radiotoxic.
	(gramas)	(Ci)	decaimento	Inalação	Ingestão
			(W)	(m <sup>3</sup> de ar)	(m <sup>3</sup> de água)
Zircônio93	4,22E+00	1,03E02	1,20E06	2,58E+06	1,29E+01
Tecnécio99	2,11E+00	3,40E-02	1,71E05	4,86E+05	1,14E+02
Iodo129	3,00E-01	5,05E05	2,34E08	2,53E+06	8,43E+02
Césio135	2,75E+00	3,02E03	1,01E06	nd	nd
Césio137	2,11E+00	1,72E+02	1,91E01	8,62E+10	8,62E+06
Promécio147	9,41E-02	5,23E+01	1,87E-02	nd	nd
Samário149	9,52E-02	1,75E–14	0,00E+00	nd	nd
Samário151	1,40E-01	3,43E+00	4,03E04	nd	nd
Urânio235	2,25E+03	4,48E03	1,17E-04	2,24E+08	1,49E+02
Urânio236	1,54E+01	9,94E-04	2,69E05	4,97E+07	3,32E+01
Urânio238	8,79E+03	2,95E03	7,50E05	9,84E+08	7,38E+01
Netúnio237	3,88E-02	2,73E-05	8,35E-07	2,73E+08	9,11E+00
Netúnio239	2,91E-13	6,76E–08	1,63E–10	nd	nd
Plutônio239	7,75E+00	4,81E-01	1,48E-02	8,04E+12	9,64E+04
Plutônio240	1,41E01	3,21E02	1,00E03	5,36E+11	6,42E+03
Plutônio241	3,11E-03	3,21E-01	9,95E-06	1,07E+11	1,60E+03
Plutônio242	3,82E-05	1,46E07	4,31E09	2,43E+06	2,92E-02
Plutônio244	1,10E–12	1,95E–17	5,66E-19	nd	nd
Amerício241	1,89E03	6,48E03	2,16E-04	3,24E+10	1,62E+03
Amerício243	3,39E07	6,76E–08	2,17E09	3,38E+05	1,69E-02
Cúrio242	6,88E07	2,27E-03	8,37E–05	5,69E+08	1,14E+02
Cúrio243	1,31E09	6,76E08	2,48E–09	3,38E+05	1,35E-02
Cúrio244	2,18E09	1,76E–07	6,16E09	5,86E+05	2,51E02
Cúrio245	2,22E-12	3,82E-13	1,27E–14	nd	nd
Cúrio246	9,64E-15	2,97E–15	9,72E–17	nd	nd
Cúrio247	1,30E-15	1,23E-19	3,94E-21	nd	nd
Actinídeos total	1,09E+04	_1,60E+03	1,59E+00	6,26E+13	6,16E+07

Tabela 4.28 – Massa, atividade, calor de decaimento e radiotoxicidades de alguns nuclídeos para os 63 ECs em novembro de 2004.

nd – Dados não disponíveis nas bibliotecas do Origen2.1 ou do MCNP4B.

Esses resultados refletem a pequena queima dos elementos combustíveis do IPR – R1 nesses 44 anos de operação do reator. A simulação mostra redução de 96 gramas na massa de U235 em relação ao inventário inicial deste isótopo nos 63 elementos. Valor que corresponde a uma queima média de U235 igual a 4,1%. A massa de U235 queimada pelo reator é rotineiramente calculada no CDTN para atender a acordos de salvaguarda com a AIEA e ABACC. Esse cálculo de rotina baseia-se em um modelo simplificado que converte 1,0 grama de U235 queimado em 23 MWh de energia térmica, resultando, para 1892 MWh, em uma queima de 82 gramas de U235. A diferença entre esses dois valores é, portanto, inferior a 15%. Para os isótopos de plutônio o inventário soma apenas cerca de 8 gramas. As atividades do Cs137 e do Promécio147 se sobressaem, exatamente como também foi observado na simulação de queima do combustível MTR. Obviamente, a contribuição da totalidade dos actinídeos é a mais significativa (ver figura 4.18). A geração de calor após os 873 dias de decaimento é desprezível.



Figura 4.18 – Atividade de alguns nuclídeos no núcleo atual.

### 4.3.3 Núcleo EOL - Fim de Vida

Na simulação do fim de vida do IPR – R1 o modelo de cálculo considera que os outros cinco elementos combustíveis frescos com revestimento de aço inoxidável atualmente armazenados no CDTN são inseridos no núcleo atual para formar a configuração com 68 elementos combustíveis mostrada na figura 3.6. Essa configuração é então queimada até que o excesso de reatividade torne-se inferior a zero.

4.3.3.1 Reatividades

A tabela 4.29 e a figura 4.19 apresentam a variação do excesso de reatividade com a queima. As simulações mostram que o reator teria excesso de reatividade suficiente para manter-se crítico, ainda que a baixa potência, até cerca de 5500 MWh, valor quase três

#### CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E ANÁLISE

vezes superior à queima atual. A operação prolongada a 250 kW de potência tornaria-se inviável a uma queima próxima de 3500 MWh. A operação a 100 kW seria inviabilizada para cerca de 4500 MWh. Entretanto, é sempre possível obter ganhos de reatividade pelo remanejamento de elementos combustíveis no núcleo, trocando aqueles com as queimas mais altas do centro para a periferia e vice-versa. Outros valores de reatividade e queima podem ser interpolados da curva mostrada na figura 4.19.

	Energia liberada (MWh)	k <sub>eff</sub>	$\rho$ (pcm)
-:	1801	$1,03327 \pm 0,00049$	3220
	3000	$1,02163 \pm 0,00047$	2117
	5000	$1,00611 \pm 0,00047$	607
	5500	$1,00253 \pm 0,00049$	252
	6000	0,99834 ± 0,00047	-166

Tabela 4.29 - Excesso de reatividade em função da queima - 68 EC.



Figura 4.19 – Evolução do excesso de reatividade para configuração EOL – 68 EC.

### 4.3.3.2 Caracterização do combustível

A seguir são apresentados valores de massas, calor de decaimento, atividade e radiotoxicidades para o combustível do IPR - R1 irradiado até 6000 MWh. Apesar de ser

bastante improvável que o reator opere até este nível de queima, esta é a situação mais conservativa e portanto será registrada. Os valores são mostrados na tabela 4.30 e referemse ao combustível total dos 68 elementos combustíveis.

Nuclídeo	Massa	Atividade	Calor de	Radiotoxic.	Radiotoxic.
	(gramas)	(Ci)	decaimento	inalação	ingestão
			(W)	$(m^3 de ar)$	(m <sup>3</sup> de água)
Zircônio93	1,34E+01	3,07E-02	3,57E06	7,69E+06	3,84E+01
Tecnécio99	6,72E+00	9,46E02	4,75E05	1,35E+06	3,16E+02
Iodo129	9,50E01	1,39E-04	6,44E08	6,95E+06	2,32E+03
Césio135	8,65E+00	8,30E03	2,77E06	nd	nd
Césio137	7,04E+00	4,81E+02	5,33E01	2,41E+11	2,41E+07
Promécio147	5,20E01	1,37E+02	4,92E02	nd	nd
Samário149	1,02E01	1,50E-15	0,00E+00	nd	nd
Samário151	2,73E-01	4,63E+00	5,42E04	nd	nd
Urânio235	2,04E+03	4,41E03	1,16E04	2,21E+08	1,47E+02
Urânio236	4,82E+01	3,11E03	8,43E05	1,56E+08	1,04E+02
Urânio238	9,49E+03	3,19E03	8,08E05	1,06E+09	7,97E+01
Netúnio237	2,57E01	1,81E04	5,53E06	1,81E+09	6,04E+01
Netúnio239	5,14E-11	1,19E05	2,89E08	nd	nd
Plutônio239	2,27E+01	1,42E+00	4,35E02	2,35E+13	2,83E+05
Plutônio240	1,12E+00	2,56E-01	7,97E-03	4,27E+12	5,12E+04
Plutônio241	7,72E02	7,96E+00	2,47E04	2,65E+12	3,98E+04
Plutônio242	2,29E-03	8,73E06	2,58E–07	1,46E+08	1,75E+00
Plutônio244	4,55E-10	8,05E-15	2,34E-16	nd	nd
Amerício241	2,59E02	8,89E02	2,95E-03	4,44E+11	2,22E+04
Amerício243	5,99E-05	1,19E05	3,83E07	5,97E+07	2,98E+00
Cúrio242	3,19E05	1,06E01	3,89E03	2,64E+10	5,28E+03
Cúrio243	2,62E07	1,35E05	4,96E–07	6,76E+07	2,71E+00
Cúrio244	1,41E06	1,14E04	3,99E06	3,79E+08	1,63E+01
Cúrio245	4,24E09	7,28E-10	2,42E–11	nd	nd
Cúrio246	4,98E-11	1,53E-11	5,00E-13	nd	nd
Cúrio247	2,27E–14	2,11E–18	6,75E-20	nd	nd
Actinídeos total	1,16E+04	3,89E+03	3,97E+00	1,95E+14	1,52E+08

Tabela 4.30 – Massa, atividade, calor de decaimento e radiotoxicidades de alguns nuclídeos para os 68 EC a 6000 MWh.

nd – Dados não disponíveis nas bibliotecas do Origen2.1 ou do MCNP4B.

A simulação mostra redução de 307 gramas na massa de U235 em relação ao inventário inicial deste isótopo. Mesmo essa situação continua indicando uma queima pequena de U235, correspondendo a 12,1%, na média dos 68 elementos combustíveis. Porém, para os elementos combustíveis mais solicitados (os 6 elementos no anel B) a

queima média atinge 17,4% (redução de 40 gramas em um total de 230 gramas de U235 nestes 6 elementos) e a máxima, nos dois elementos mais demandados, atingiria 19,1%. Este valor é próximo à queima máxima de 20% recomendada pelo fabricante do combustível TRIGA.

Pelo modelo de cálculo dos acordos de salvaguarda (1 grama de U235 queimado  $\approx$  23 MWh de energia térmica) são 261 gramas de U235 destruídas e a diferença entre os resultados permanece próxima aos mesmos 15%. O inventário para os isótopos de plutônio atinge 24 gramas, e novamente, tem-se para a atividade do combustível o predomínio do Cs137, Promécio147 e actinídeos.

### 4.4 Opções para o Armazenamento Temporário do Combustível Gasto

A seguir são apresentados os resultados das análises de criticalidade, blindagem e transferência de calor residual para as duas opções avaliadas para receber o combustível irradiado do IPR – R1 ao final de sua vida operacional. A opção de estocagem úmida refere-se aos poços de estocagem construídos ao lado do reator e a opção a seco, no momento apenas um projeto, consta do casco duplo propósito que se construído poderia ser utilizado também por outros reatores de pesquisa.

### 4.4.1 Casco Duplo Propósito – Estocagem a Seco, TRIGA e MTR

A figura 4.20 mostra o modelo KENO-VI usado na análise de criticalidade do casco duplo propósito carregado com combustível TRIGA. As análises de blindagem e transferência do calor residual são precedidas do cálculo dos termos fontes de radiação e de calor de decaimento.



Figura 4.20 - Modelo KENO-VI para o casco carregado com 78 EC TRIGA.

# 4.4.1.1 Criticalidade

Os resultados dos cálculos de criticalidade são apresentados nas tabelas 4.31 e 4.32. Elas mostram os valores de  $k_{eff} \pm 2\sigma$  para o casco carregado com 78 elementos TRIGA ou com 21 elementos MTR. Em ambos os casos os resultados referem-se às condições de moderação mencionadas no capítulo 3. O mais alto  $k_{eff}$  ocorre quando o casco é carregado com 21 elementos MTR, inundado com água por dentro e por fora e com as dimensões das células da cesta reduzidas. Sob condições normais de operação (casco seco) o  $k_{eff}$  para combustível MTR é muito pequeno enquanto que para o combustível TRIGA ele atinge quase a metade do valor encontrado quando o casco é inundado. Tal fato comprova a importância da liga de hidreto de zircônio como moderador no combustível TRIGA. Em qualquer das situações simuladas o critério de segurança para criticalidade é respeitado e os resultados mostram que os elementos combustíveis podem ser armazenados e/ou transportados seguramente subcríticos mesmo na situação hipotética de um acidente em que o casco seja inteiramente inundado por água.

Condição	$(k_{eff} \pm 2\sigma)$	$(k_{eff} \pm 2\sigma)$
	MCNP	SCALE
78 elementos TRIGA e ar dentro do casco	0,41213 ± 0,00066	0,42678 ± 0,00076
78 elementos TRIGA e água dentro do casco	0,87049 ± 0,00072	0,88093 ± 0,00094
78 elementos TRIGA e água dentro e fora do casco	0,87165 ± 0,00070	0,88189 ± 0,00100

Tabela 4.31 – Valores de  $k_{eff}$  para o casco carregado com 78 ECs TRIGA.

Tabela 4.32 – Valores de  $k_{eff}$  para o casco carregado com 21 ECs MTR.

Condição	$(k_{eff} \pm 2\sigma)$ MCNP	$(k_{eff} \pm 2\sigma)$ SCALE
21 elementos MTR e ar dentro do casco	0,05073 ± 0,00008	0,05303 ± 0,00030
21 elementos MTR e água dentro do casco	0,86348 ± 0,00084	0,87931 ± 0,00098
21 elementos MTR e água dentro e fora do casco	0,86412±0,00084	0,87893 ± 0,00106
21 elementos MTR, água dentro e fora do casco e células da cesta com 8,7 cm x 8,7 cm	0,89890 ± 0,00082	0,91461 ± 0,00094

Nos cálculos com KENO-VI sempre foi utilizada a biblioteca de seções de choque ENDF/B-V com 238 grupos de nêutrons do SCALE. As diferenças encontradas entre os  $k_{eff}$  calculados com MCNP e com KENO podem ser atribuídas principalmente às diferentes seções de choque utilizadas pelos dois programas (NEA, 1999).

Um critério de projeto de cascos para transporte de combustível irradiado exige que o casco e a cesta devem manter sua integridade estrutural após sofrer os testes tipo B (NETO e MOURÃO, 2002). Entretanto, podem ocorrer deformações locais nas chapas e na cesta. A extensão dessas deformações só podem ser avaliadas após os testes, contudo, supõe-se que tais alterações geométricas serão bem menos drásticas que a hipótese já considerada de redução das células da cesta.

### 4.4.1.2 Determinação das fontes de radiação e de calor de decaimento

Dois tipos de fontes de radiação foram determinadas. O primeiro tipo refere-se aos elementos tipo MTR com combustível de U<sub>3</sub>O<sub>8</sub>-Al. O segundo, ao combustível com revestimento de alumínio do TRIGA IPR – R1. O módulo ORIGEN-ARP do SCALE foi usado para determinar as fontes de nêutrons e gamas usando bibliotecas de dados especificamente elaboradas para os dois tipos de combustível geradas com o módulo SAS2H. As fontes foram estimadas conservativamente para uma queima de 50% nos combustíveis MTR e 25% para TRIGA. Apenas um termo fonte de radiação foi determinado para cada tipo de combustível e refere-se a um período de cinco anos de decaimento após a irradiação. O espectro energético e a fluência dos gamas e nêutrons podem ser vistos na tabela 4.33. Esses valores são por elemento combustível, portanto, para obter a fluência total no interior do casco basta multiplicá-los pelo número de elementos. Gamas de baixa energia, os quais, são mais facilmente blindados constituem a maioria das partículas. O mesmo se observa para nêutrons. A discretização dos grupos de energia para os nêutrons e gamas obedeceu à estrutura da biblioteca 27N-18COUPLE do SCALE4.4A.

Energia	Gamas		Energia	Nêutrons	
(MeV)	(fótons/s/element)		(MeV)	(nêutrons/s/element)	
	MTR	TRIGA		MTR	TRIGA
10,0 a 8,0	2,8249E+00	1,0	20,0 a 6,43	8,018E+01	1,342E+00
8,0 a 6,5	1,3357E+01	1,0	6,43 a 3,0	1,263E+03	2,563E+01
6,5 a 5,0	6,8483E+01	1,3068E+00	3,0 a 1,85	2,004E+03	4,627E+01
5,0 a 4,0	1,7173E+02	3,2915E+00	1,85 a 1,40	8,357E+02	1,735E+01
4,0 a 3,0	2,9648E+07	6,1579E+05	1,40 a 0,90	9,196E+02	1,725E+01
3,0 a 2,5	2,6175E+08	5,4300E+06	0,90 a 0,40	8,828E+02	1,530E+01
2,5 a 2,0	3,3792E+10	6,9080E+08	0,40 a 0,10	1,711E+02	2,949E+00
2,0 a 1,66	5,6799E+09	1,5103E+08			
1,66 a 1,33	7,3329E+10	1,6087E+09			
1,33 a 1,0	1,8011E+11	5,0044E+09			
1,0 a 0,8	7,4752E+11	1,4928E+10			
0,8 a 0,6	1,2597E+13	6,8141E+11			
0,6 a 0,4	2,0304E+12	4,7645E+10			
0,4 a 0,3	5,4545E+11	2,4711E+10			
0,3 a 0,2	7,3889E+11	3,3934E+10			
0,2 a 0,1	2,6894E+12	1,1497E+11			
0,1 a 0,05	3,3567E+12	1,5790E+11			
0,05 a 0,01	1,1223E+13	5,3731E+11			
Total	3,4221E+13	1,6203E+12	Total	6,157E+03	1,261E+02

Tabela 4.33 - Fontes de nêutrons e gamas calculadas para os combustíveis TRIGA e MTR.

#### CAPÍTULO 4 – RESULTADOS E ANÁLISE

O modelo assume que a emissão das partículas é uniforme em todo o comprimento ativo dos elementos combustíveis. Esta hipótese se aplica a comprimentos ativos pequenos, caso dos elementos combustíveis de reatores de pesquisa. A fonte de nêutrons considera a contribuição de nêutrons advindos da fissão espontânea e, para os combustíveis MTR, das reações  $\alpha$ -n no oxigênio. Devido à pequena fluência neutrônica, após cinco anos de decaimento, a radiação gama induzida por estes nêutrons é desconsiderada.

As fontes de calor de decaimento foram determinadas utilizando o mesmo modelo de cálculo usado na determinação das fontes de radiação, porém os períodos de decaimento após a irradiação foram de um, três e cinco anos. Foi também necessário inserir na seqüência de cálculo o módulo OPUS do SCALE. O calor de decaimento por elemento combustível é mostrado na tabela 4.34.

Tabela 4.34 - Calor de decaimento calculado para os combustíveis TRIGA e MTR.

Tempo de resfriamento (anos)	Potência por EC MTR (Watts)	Potência por EC TRIGA (Watts)
1	49,9	1,1
3	11,9	0,4
5	6,0	0,3

### 4.4.1.3 Blindagem

Os resultados dos cálculos de blindagem podem ser vistos nas tabelas 4.35 a 4.37. Elas mostram os valores de taxas de dose nos pontos de maior intensidade nas superficies externas da lateral e da tampa do casco (a tampa constitui a pior situação axial porque tem chapas de aço inox mais finas que o fundo) para ambos os tipos de elementos analisados. Os desvios padrão dos cálculos de dose mostrados nestas tabelas são inferiores a 10% tanto para resultados de SCALE quanto de MCNP (em ambos foram usados detectores de superfície).

A contribuição dos nêutrons na dose total é desprezível em relação aos gamas. A fonte de nêutrons determinada na seção anterior não considera a multiplicação subcrítica que ocorre ao serem agrupados vários elementos combustíveis dentro do casco. Segundo USDOE (2002) o fator de multiplicação de dose devido à multiplicação subcrítica de nêutrons em um sistema com  $k_{eff} = 0,9144$  é estimado em 2,60. Assim sendo, as taxas de

### CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E ANÁLISE

dose calculadas para nêutrons devem ser multiplicadas por este valor. Entretanto, como essas taxas são muito pequenas mesmo triplicando seus valores, tem-se que a principal contribuição vem mesmo da radiação gama. As maiores doses ocorrem na tampa do casco. De qualquer modo, esses valores estão muito abaixo do limite especificado pelo critério de blindagem.

Fonte	Taxas de dose na superfície lateral (µSv/h)			
	SCALE4.4A	MCNP		
Nêutron	< 1	< 1		
Gama	19	30		
Total	20	31		
Fonte	Taxas de dose na tampa (µSv/h)			
	SCALE4.4A	MCNP		
Nêutron	< 1	< 1		
Gama	32	62		
Total	33	63		

Tabela 4.35 - Taxas de dose no casco para cesta com 78 ECs TRIGA.

Tabela 4.36 – Taxas de dose no casco para cesta com 21 ECs MTR.

Fonte	Taxas de dose na superficie lateral (µSv/h)			
	SCALE4.4A	MCNP		
Nêutron	6	4		
Gama	186	224		
Total	192	228		
Fonte	Taxas de dose na	tampa (µSv/h)		
	SCALE4.4A	MCNP		
Nêutron	4	4		
Gama	367	334		
Total	371	338		

Os valores nas tabelas 4.35 e 4.36 não refletem a influência das duas penetrações do casco. A tabela 4.37 mostra as taxas de dose nas superfícies externas para diferentes espessuras de chumbo (valores apenas para combustível MTR devido à fluência da fonte de radiação do combustível TRIGA ser menor). Essa avaliação, pela mínima espessura de blindagem, aborda o problema provocado pelos furos no casco de uma maneira simplista e fortemente conservativa, pois objetiva apenas assegurar que as taxas de dose serão inferiores ao limite do critério de blindagem. Essa espessura mínima de chumbo deve ser de pelo menos 8,0 cm na direção radial e 7,0 cm axialmente entre cada segmento vazio de tubo e a superfície externa do casco.

				Su	perficie	lateral	- Radial			
Espessura de chumbo (cm)	14,0				8,0			7,0		
Código	SCA	LE	MCN	p	SCALE	M	CNP	SCAL	E I	MCNP
Taxa de dose gama(µSv/h)	18	6	224		5686	6	534	1114	6	12688
				Sur	erficie d	la tamp	a - Axia	1		
Espessura de 12,0 10,0 chumbo (cm)		),0	8	,0	7	,0	6	<b>,</b> 0		
Código	SCA LE	MC NP	SCA LE	MC NP	SCA LE	MC NP	SCA LE	MC NP	SCA LE	MCNP
Taxa de dose gama(µSv/h)	367	334	1230	1050	3329	3648	6804	6557	11766	13400

Tabela 4.37 – Taxas de dose para diferentes espessuras de chumbo (21 EC MTR).

Uma análise detalhada dos efeitos das penetrações no casco é possível somente com MCNP. Um modelo MCNP foi desenvolvido a fim de avaliar com precisão o transporte de fótons através de uma penetração radial no casco. Esta avaliação permitiu quantificar o conservadorismo da abordagem pela mínima espessura de blindagem. A simulação considerou um furo com 0,8 cm de diâmetro atravessando radialmente o casco. As taxas de dose foram registradas em um detector de superficie circular (7,5 cm de raio) a 1,0 cm da parede externa do casco e em outro detector pontual com 7,5 cm de raio localizado a 100,0 cm da parede do casco. Estes dois detectores alinham-se na mesma direção do furo. Outros detectores foram posicionados em direções diferentes a fim de verificar a consistência dos resultados. Trabalhou-se com desvio padrão inferior a 5% para detectores pontuais e inferior a 10% para os de superfície.

Cinco situações foram simuladas. Na primeira, considerou-se o casco sem furo e na segunda, um furo atravessando em linha reta toda a parede do casco. Nas outras três considerou-se o furo com uma única curva de 90° (cotas com 2 cm de diferença entre os eixos do furo antes e após a curva) localizada nas seguintes posições radiais: próximo à superfície interna do casco (r = 34,8 cm), metade da espessura da parede (r = 39,8 cm) e, próximo à superfície externa (r = 45,8 cm). Os resultados podem ser vistos na tabela 4.38 e figura 4.21. Percebe-se que uma única curva de 90° (quebrando o caminho da radiação) próxima à meia espessura da parede é suficiente para reduzir as taxas de dose a valores próximos àqueles encontrados para a blindagem maciça, isto é, sem furo.

	Taxas de dose (µSv/h) – MCNP			
Situação	a 1cm da superfície radial	a 100 cm da superficie radial		
Perfuração retilínea	22096	1051		
Perfuração com a curva de 90° em r = $34,8$ cm	153	79		
Perfuração com a curva de 90° em r = $39,8$ cm	151	29		
Perfuração com a curva de 90° em r = $45,8$ cm	2514	127		
Nenhuma perfuração	137	28		

Tabela 4.38 - Efeito da perfuração radial do casco na taxa de dose gama - 21 ECs MTR.



Figura 4.21 – Influência de uma perfuração radial no casco sobre a taxa de dose.

4.4.1.4 Térmica – calor de decaimento

O cálculo térmico do casco foi efetuado com a seqüência HTAS1 do SCALE, a qual usa o código de diferenças finitas HEATING7.2 para simular a transferência de calor. Os três termos fonte de calor para, um, três e cinco anos de resfriamento foram usados. Apenas condições estacionárias foram avaliadas sendo a temperatura ambiente igual a 38,0°C, convecção natural do ar em torno do casco e a carga térmica solar assumindo dois valores, zero e 122,92 Btu/hr.ft<sup>2</sup>. As temperaturas máxima (parede interna do casco) e mínima (parede externa) calculadas para o casco carregado com 21 ECs MTR e com 78 ECs TRIGA são mostradas nas tabelas 4.39 e 4.40. Percebe-se em todos os casos que as alterações de temperatura devido à exposição ao sol são muito superiores àquelas devidas apenas ao calor de decaimento dos combustíveis. Para o casco carregado com elementos TRIGA as alterações de temperatura devido exclusivamente ao calor de decaimento são irrisórias mesmo na pior situação (combustível resfriado por apenas um ano). Em todos os casos as temperaturas na superfície externa do casco são inferiores aos limites especificados pelo critério térmico.

	Carga solar (Btu/hr.ft <sup>2</sup> )					
		0	122,92			
	Temperati	ıra (Celsius)	Temperatura	ı (Celsius)		
Decaimento (anos)	Máxima	Mínima	Máxima	Mínima		
1	41,2	40,7	84,0	83,4		
3	38,7	38,6	82,7	82,5		
5	38,3	38,2	82,5	82,3		

Tabela 4.39 - Temperaturas para casco com 21 ECs MTR.

Tabela 4.40 - Temperaturas para casco com 78 ECs TRIGA.

	Carga solar (Btu/hr.ft <sup>2</sup> )					
		0	122,92			
	Temperatu	ura (Celsius)	Temperatura	ı (Celsius)		
Decaimento (anos)	Máxima	Mínima	Máxima	Mínima		
1	38,1	38,1	82,4	82,3		
3	38,0	38,0	82,3	82,2		
5	38,0	38,0	82,3	82,2		

# 4.4.2 Poços - Estocagem Úmida, TRIGA

### 4.4.2.1 Criticalidade

As simulações consideraram o carregamento de um único poço e também o conjunto dos doze poços de estocagem. Na análise do conjunto foi conservativamente assumido que os doze poços encontram-se lado a lado formando uma matriz 4x3 com distância mínima, centro a centro, entre cada poço de 90 cm. Os poços foram modelados contendo a cesta com os seis elementos combustíveis TRIGA e totalmente inundados por água. A parede é revestida por uma camada de alumínio e outra de aço. Foi assumido ainda que o espaço entre os poços é preenchido por concreto ou água. A tabela 4.41 apresenta os resultados das simulações com MCNP e com KENO-VI/SCALE. Todos os valores são muito inferiores ao limite de  $k_{eff} < 0,95$ . A figura 4.22 é uma visualização (cortes axial e radial) dos modelos KENO-VI e MCNP para um poço e a figura 4.23 a visualização MCNP para os doze poços.

Condição avaliada	$k_{eff} \pm 2\sigma$	$k_{eff} \pm 2\sigma$
	MCNP	KENO/SCALE
1 poço, EC Alumínio, concreto em volta	0,34527 ± 0,00088	$0,36079 \pm 0,00074$
1 poço, EC Alumínio, água em volta	0,33135 ± 0,00082	0,34674 ± 0,00088
1 poço, EC inox, concreto em volta	0,34131 ± 0,00082	$0,35797 \pm 0,00078$
1 poço, EC inox, água em volta	0,33003 ± 0,00090	$0,\!34526\pm0,\!00076$
12 poços, EC Alumínio, concreto em volta	0,34508 ± 0,00090	0,36025 ± 0,00090
12 poços, EC Alumínio, água em volta	0,33201 ± 0,00082	0,34615 ± 0,00084
12 poços, EC inox, concreto em volta	0,34122 ± 0,00082	0,35833 ± 0,00076
12 poços, EC inox, água em volta	0,32900 ± 0,00084	0,34514 ± 0,00088

Tabela 4.41 – Valores de  $k_{eff}$  para os poços de estocagem.





Figura 4.22 - Cortes axial (KENO-VI e MCNP) e radial (MCNP) para 1 poço.



Figura 4.23 - Cortes axial e radial do modelo MCNP para os 12 poços.

## 4.4.2.2 Blindagem

Somente MCNP foi utilizado nas simulações de blindagem porque as geometrias pré-definidas para análise de blindagem do SAS4/SCALE não são adequadas para os poços. Os resultados dos cálculos de blindagem podem ser vistos na tabela 4.42 e na figura 4.24 e mostram os valores de taxas de dose na superficie da tampa do poço contendo 6 elementos combustíveis e a cobertura de água variando de 0 a 250 cm. É necessário cerca de 1 metro de água para reduzir a dose na tampa abaixo dos 10.000 µSv/h recomendados para dispositivos de transporte de material nuclear irradiado. Para respeitar o limite de dose efetiva ocupacional de 10 µSv/h o nível de água nos poços deve ser de quase 2 metros.

	Taxas de dose na tampa (µSv/h) – MCNP	
Nível de água (cm)	Nêutron	Gama
0	<< 1	46585
80		12392
140		112
190		2,4
250		0,05

Tabela 4.42 – Taxas de dose no poço contendo 6 EC TRIGA.



Figura 4.24 - Taxas de dose no poço x cobertura de água.

### 4.4.2.3 Térmica - calor de decaimento

Os poços estão enterrados no interior da sala do reator e portanto a carga térmica solar sobre eles é considerada nula. Assim, eles têm como única fonte de calor o decaimento radioativo nos elementos combustíveis. Como cada poço abriga apenas 6 elementos combustíveis TRIGA, tem-se que a fonte de calor em cada poço varia de 6,8 Watts, após 1 ano de resfriamento, a 1,7 Watt após 5 anos. Estas fontes de calor são tão irrisórias que quando inseridas no módulo de cálculo HTAS1 não produzem variações mensuráveis na temperatura.

# **CAPÍTULO 5 – CONCLUSÕES E SUGESTÕES**

A metodologia de cálculo neutrônico que acopla o código de transporte por Monte Carlo MCNP e o código de queima e decaimento radioativo ORIGEN2.1, através de MONTEBURNS, foi implantada com sucesso em microcomputadores Linux. Sua implantação também em um cluster de microcomputadores demonstrou que esta é uma alternativa viável e de baixo custo para reduzir o tempo de processamento nas simulações com Monte Carlo.

Uma vez implantada a metodologia de cálculo o passo seguinte consistiu na sua validação para posterior emprego na simulação do reator de pesquisas IPR - R1. Essa validação foi efetuada através dos experimentos "benchmark" do reator TRIGA de Ljubljana e dos experimentos no reator MTR RA-3. O "benchmark" TRIGA é limitado a de reatividade valores a simulação mostrou 0 sistema e sua que MCNP/MONTEBURNS/ORIGEN2.1 e o modelo desenvolvido reproduzem com boa precisão os valores de reatividade medidos tanto para o combustível TRIGA fresco quanto irradiado. Por sua vez, os experimentos com combustível MTR no reator RA-3, a despeito de este não ser um reator TRIGA, proporcionaram as únicas informações de análise química destrutiva por espectrometria de massa sobre queima de U235 em combustível de um reator de pesquisas a serem publicadas para fins de validação de metodologias de cálculo. Os valores calculados com MONTEBURNS e os medidos para queima de U235 nas duas placas combustíveis diferem apenas cerca de 6%. Análises químicas em um maior número de pontos das placas combustíveis aliado a medições quantitativas sobre o teor de outros nuclídeos, notadamente Pu239 e Nd148, permitiriam uma determinação de queima ainda mais precisa.

A simulação do IPR – R1 propriamente envolveu a determinação de vários parâmetros físicos do reator. De imediato a simulação esbarra em uma fonte de incerteza nos dados do reator referente aos discos de tri-óxido de samário utilizados como veneno queimável nos elementos combustíveis com revestimento de alumínio. A inexistência na literatura aberta de dados precisos sobre a composição e geometria destes discos e, uma vez que, mesmo a obtenção desses dados diretamente com o fabricante do reator mostrou-se infrutífera tornou obrigatório estimar indiretamente uma composição inicial e geometria para o veneno queimável tendo como referência a reatividade negativa introduzida pelos

129
#### CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

discos em núcleo fresco e ligeiramente supercrítico. Os cálculos para estimar a composição dos discos de veneno queimável indicam que a liga de  $Sm_2O_3$ -Al deve ter cerca de 1% de  $Sm_2O_3$  e 99% Al para reduzir a reatividade do núcleo inicial nos aproximadamente 1000 pcm esperados. Os cálculos de evolução do veneno queimável indicam uma progressiva redução na concentração de Samário e o seu efeito sobre o excesso de reatividade do núcleo torna-se estatisticamente desprezível quando o IPR – R1 atinge aproximadamente 1600 MWh de operação.

Os cálculos de Monte Carlo para reatividade (excesso, valor de barras e valor de elementos combustíveis) nas diversas configurações simuladas diferem dos resultados experimentais em aproximadamente até 150 pcm para excesso de reatividade e até 220 pcm para reatividade de barras e de elementos combustíveis. São bons resultados quando se observa que o desvio padrão nas simulações situa-se em torno de 50 pcm, que somente as incertezas geométricas e nas composições dos materiais podem comprometer a precisão do modelo MCNP em até 500 pcm e que os melhores resultados de cálculos de excesso de reatividade pela teoria da difusão apresentaram discordâncias superiores a até 1500 pcm em relação aos experimentais, ou seja, discrepâncias dez vezes maiores que as verificadas com Monte Carlo. Para parâmetros calculados como variação de  $k_{eff}$ , reatividade de barras e de elementos combustíveis, as discrepâncias por Monte Carlo ou por difusão são equivalentes.

A caracterização axial e espectral do fluxo neutrônico nos dois principais dispositivos de irradiação do IPR – R1, mesa giratória e tubo central, mostra que a variação axial do fluxo na mesa giratória é bem mais suave que no tubo central. A mesa proporciona também uma melhor termalização de nêutrons que a observada no tubo central. Futuramente, sugere-se a realização de experimentos para "benchmark" de fluxo de nêutrons no tubo central e na mesa giratória. Esses experimentos serviriam não só para validação de cálculos mas também proporcionariam ganhos na precisão das análises por ativação neutrônica de amostras irradiadas no reator graças ao melhor conhecimento da distribuição espectral e espacial do fluxo de nêutrons nos dispositivos de irradiação.

A potência térmica calculada com MCNP para a configuração atual de núcleo do reator apresentou um valor 7,7% inferior ao valor da potência nominal, dentro da precisão experimental das calibrações térmicas realizadas no reator e demonstra, portanto, um resultado satisfatório. Os elementos combustíveis nas posições B1 e B4 são os mais "quentes" do reator. Dissipam cerca de 10% a mais potência que os demais elementos no

#### CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES

anel B graças à melhor termalização neutrônica proporcionada pelo maior volume de água em torno deles produzido pela retirada das barras de Controle e Segurança. A comparação com cálculos por difusão mostram resultados equivalentes.

A caracterização da queima do combustível demonstra a pequena queima dos elementos combustíveis do IPR – R1. Pouco mais de 4% do U235 no núcleo foi queimado durante os seus 44 anos de operação.

A simulação para tentar prever o fim da vida operacional do reator assumiu um núcleo com a totalidade dos 68 elementos combustíveis TRIGA que o CDTN dispõe inseridos no núcleo. Os cálculos mostram que o reator teria excesso de reatividade para operar a 250 kW de potência até uma queima próxima de 3500 MWh e a 100 kW até cerca de 4500 MWh. A criticalidade a baixa potência seria possível até cerca de 5500 MWh. Do ponto de vista dos efeitos da irradiação sobre o combustível até este nível de queima não é necessário retirar nenhum elemento do núcleo, pois mesmo atingindo esta queima os elementos mais queimados, os no anel B, ainda teriam queima inferior à máxima recomendada pelo fabricante do combustível. Contudo, o remanejamento de elementos é recomendado pois possibilita ganhos no excesso de reatividade que permitiriam manter a operação por algum tempo adicional.

As duas opções, poços de estocagem ou casco duplo propósito, avaliadas para o armazenamento temporário dos elementos combustíveis irradiados que serão descartados ao final da vida operacional do IPR – R1 mostraram-se adequadas do ponto de vista de segurança quanto à criticalidade, de blindagem e da remoção do calor residual. O casco duplo propósito pode ser também uma opção para o combustível gasto de reatores MTR.

## REFERÊNCIAS

- AHNERT, I., 1980. Programa WIMS-TRACA para el calculo de elementos combustibles. Manual de usuario y datos de entrada. Junta de Energia Nuclear; Madrid.
- AYYUB, B. M., MCCUEN, R. H., 1997. Probability, statistics and reliability for engineers. CRC Press.
- BELL G. I., GLASSTONE S., 1970. Nuclear reactor theory. Van Nostrand Reinhold Company.
- BHUIYAN, S. I. et al., 1992. Generation of a library for reactor calculations and some applications in core and safety parameter studies of the 3-MW TRIGA Mark II research reactor, Nuclear Technology, Vol. 97.
- BOESSERT, W. et al., 1999. Management of Rossendorf research reactor spent fuel elements. RRFM99, International Conference on Research Reactor Fuel Management.
- BRIESMEISTER, J. F., 1997. MCNP A General Monte Carlo N-Particle transport code, version 4B. Los Alamos National Laboratory, report LA-12625-M.
- CARNEIRO, F. A. N., 1972. Cálculo para o TRIGA, IPR, Nota Interna PMC-71.
- CARNEIRO, F. A. N., TERRA, J. L., 1973. Dados para o cálculo do TRIGA, IPR, Nota Interna GARA-6.
- CASHWELL, E. D., EVERETT, C. J., 1959. A practical manual on the Monte Carlo method for random walk problems. Pergamon Press.
- CDTN, 1998<sup>a</sup>. CTORP Curso de Treinamento de Operadores em Reatores de Pesquisa, Vol. 1 - 5<sup>°</sup> edição.
- CDTN, 1998<sup>b</sup>. CTORP Curso de Treinamento de Operadores em Reatores de Pesquisa; Vol. 2 - 5<sup>°</sup> edição.
- CDTN, 2000. Relatório de Análise de Segurança do Reator TRIGA IPR RI.
- CETNAR, J. GUDOWSKI, W. WALLENIUS, J., 1999. Transmutation calculations with <u>Monte-Carlo continuous energy Burnup system (MCB)</u> - IAEA ADS-benchmarks. 3<sup>rd</sup> International Conference on Accelerator Driven Transmutation Techniques and Applications - ADTTA99, Prague.
- CHANG, G. S., RYSKAMP, J. M., 2000. Depletion analysis of mixed-oxide fuel pins in light water reactors and the advanced test reactor. Nuclear Technology, vol. 129, March 2000, p. 326-337.
- CNEA, 1995. Fabricación EC prototipo 04 de alta carga de U3Six/Al. Comision Nacional de Energia Atomica, División ECRI, Departamento Combustibles Nucleares, Argentina.
- CONECTIVA, 2000<sup>a</sup>. Guia do usuário do Conectiva Linux 6.0 Casa e escritório. 1<sup>a</sup> edição.
- CONECTIVA, 2000<sup>b</sup>. Guia rápido de instalação do Conectiva Linux 6.0 Casa e escritório. 1ª edição.
- CROFF, A. G., 1980. A user's manual for the ORIGEN2 computer code. ORNL, report ORNL/TM-7175.

- CROFF, A. G., 1981. ORIGEN2 code package CCC-371. ORNL, Informal Notes.
- D'ALBUQUERQUE, E. F., 1974. Cálculos para o TRIGA, CBTN-IPR, Nota Técnica PAR-T-74/61.
- DALLE, H. M. et al., 1998. Validação da metodologia de cálculo neutrônico do reator TRIGA IPR-RI. CDTN/CNEN, Belo Horizonte, NI-CT4-008/98.
- DALLE, H. M., 1999. Cálculo neutrônico do reator TRIGA IPR-R1 utilizando WIMSD4 e CITATION. Belo Horizonte, DEN/EEUFMG, Dissertação (mestrado).
- DALLE, H. M., PEREIRA, C., 2000. Simulação com WIMSD4 e CITATION do TRIGA Mark II benchmark experiment. In XII ENFIR, Rio de Janeiro.
- DALLE, H. M. et al., 2000. Simulação com WIMSD4 e CITATION de cinco configurações de mícleo do reator TRIGA IPR-RI. In XII ENFIR, Rio de Janeiro.
- DALLE, H. M., MUNIZ, F. J., 2002. Computers cluster for parallel processing with the MCNP4B code: Linux + PVM + MCNP4B. Research and Development Brazilian Journal, São Paulo, v. 4, n. 2, p. 241-244.
- DALLE, H. M. et all., 2002. Neutronic calculation to the TRIGA IPR-RI reactor using the WIMSD4 and CITATION codes. Annals of Nuclear Energy, 29 (8), p. 901-912.
- DALLE, H. M., JERAJ, R., 2002. Validation of the Monteburns code for criticality calculations of TRIGA reactors. Research and Development Brazilian Journal, São Paulo, v. 4, n. 2, p. 91-94.
- DALLE, H. M., 2003. Avaliação neutrônica do reator TRIGA IPR-R1 configuração com 63 elementos combustíveis e barra de regulação em F16. CDTN/CNEN, NI-EC3-01/03, Belo Horizonte.
- DALLE, H. M. et all., 2003. Benchmark measurements and calculations of U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al MTR fuel plates with burned fuel. International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile.
- DENG, L. et al., 2003. *Monte Carlo transport and burnup calculation*. Annals of Nuclear Energy, 30, p. 127-132.
- DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J., 1976. Nuclear reactor analysis. New York, John Wiley & Sons.
- EL-WAKIL, M. M., 1971. Nuclear Heat Transport. International Textbook Company.
- FOWLER et al., 1969. Nuclear reactor core analysis code: CITATION. Oak Ridge National Laboratory.
- GA, 1958<sup>a</sup>. Technical Foundation of Triga. USA, General Atomic, GA-471.
- GA, 1958<sup>b</sup>. Hazard report for 100-kW TRIGA Mark II reactor. USA, General Atomic, GA-573.
- GA, 1960. TRIGA Mark I Reactor Mechanical Maintenance and Operating Manual. USA, General Atomic, GA-1544.
- GA, 1970. Safeguards summary report for the New York University TRIGA MARK I reactor. USA, General Atomic, GA-9864.
- GA, 2005. General Atomic, Home page at http://triga.ga.com.

- GEIST, A. et al., 1994. PVM: <u>Parallel Virtual Machine</u>. A users' guide and tutorial for networked parallel computing. The MIT Press, Cambridge, Massachusetts.
- GNU, 2001. G77 0.5.26 (GCC 3.0.3) Manual. Gnu Compiler Collection.
- GOMEZ J., 1995. Propuesta de irradiación en el RA-3 de EC placa de bajo enriquecimiento con siliciuros de uranio. CNEA, División ECRI, Departamento Combustibles Nucleares, Argentina.
- GOORLEY, T., 1997. Informal note on "MCNP4B in parallel on PC's running Linux".
- GUIMARÃES, R. R. R., 1985. Levantamento das distribuições dos fluxos de nêutrons térmicos e rápidos no núcleo do reator IPR-R1. Belo Horizonte: Departamento de Engenharia Nuclear, Universidade Federal de Minas Gerais, 132 p, Tese (Mestrado).
- HAMID, S. A., KLEIN, A. C., 1994. Monte Carlo Burnup analysis code development and application to an incore thermionic space nuclear power system. 29<sup>th</sup> Intersociety Energy Conversion Engineering Conference, USA.
- HANAN, N. A. et al., 1998. A Monte Carlo burmup code linking MCNP and REBUS. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, RERTR1998, Brazil.
- HANAN, N. A. et al., 2002<sup>a</sup>. Revisiting the HFR-Petten LEU conversion study. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, RERTR2002, Argentina.
- HANAN, N. A. et al., 2002<sup>b</sup>. Comparisons of diffusion theory and Monte Carlo burnup. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, RERTR2002, Argentina.
- HARGROVE, W.W. et al., 2001. The do-it-yourself supercomputer. Scientific American, August.
- HESSE, U. et al., 2000. KENOREST A new coupled code system based on KENO and OREST for criticality and burnup inventory calculations. Technical Committee Meeting on Implementation of Burnup Credit in Spent Fuel Management Systems, Austria.
- IAEA, 1985<sup>a</sup>. Regulations for the safe transport of radioactive materials. Safety Series N° 6, Vienna.
- IAEA, 1985<sup>b</sup>. Advisory material for the IAEA regulations for the safe transport of radioactive materials. Safety Series N° 37, Vienna.
- IAEA, 2000. Working material report IAEA-RER/9/058. Workshop on characterization, management and storage of spent fuel from research and test reactors, Poland.
- ICRP, 1990. 1990 recommendations of ICRP. International Commission on Radiological Protection.
- IORGULIS, C. COSTESCU, C., 1990. Tridimensional neutronic calculation methods used in romanian 14-MW TRIGA-SSR fuel management and irradiation experiments evaluation, 11<sup>th</sup> European TRIGA Users' Conference.
- JERAJ, R. GLUMAC, B. MAUCEC, M., 1997. Monte Carlo Simulation of the TRIGA MARK II Benchmark Experiment. Nuclear Technology, vol. 120, December.

- JERAJ, R., RAVNIK, M., 1999. TRIGA MARK II reactor: U(20%) zirconium hydride fuel rods in water with graphite reflector. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, Paris, NEA, NEA/NSC/DOC/(95)03/III.
- JERAJ, R. et all., 2002. Monte Carlo simulation of the TRIGA Mark II benchmark experiment with burned fuel. Nuclear Technology, vol. 137.
- KAHN, H., 1954. Applications of Monte Carlo. Atomic Energy Commission Report AECU-3259.
- KLOOSTERMAN, J. L., KUIJPER, J. C., LEEGE, P. F. A., 1996. The OCTOPUS burnup and criticality code system. International conference on the physics of reactors, PHYSOR96, Japan.
- KULIKOWSKA, T., 1994. Lattice cell calculations, slowing down theory, research reactor core calculations - The WIMS computer code. Proceedings of the workshop on nuclear reactors – Physics, Design and Safety, ICTP, Italy.
- LAMARSH, J. R., 1977<sup>a</sup>. Introduction to nuclear engineering. 3° ed., Addison-Wesley Publishing Company.
- LAMARSH, J. R., 1977<sup>b</sup>. Introduction to nuclear reactor theory. 3° ed., Addison-Wesley Publishing Company.
- LIMA, J. M., ANDRADE, V. M., 1969. Utilização do reator TRIGA IPR R1 do IPR da UFMG durante oito anos de operação. Belo Horizonte, IPR/UFMG/CNEN, Nota DR-18.
- LIMA, J. M., ANDRADE, V. M., 1970. Reator de pesquisa como fonte de produção de radioisótopos. Belo Horizonte, IPR/UFMG/CNEN, Nota DR-27.
- LUDWIG, S., 1999. ORIGEN2, version 2.1. Release Notes.
- LUX, I., KOBLINGER, L., 1990. Monte Carlo particle transport methods: neutron and photon calculations, CRC Press Inc.
- MACFARLANE, R. E., MUIR, D. W., 1994. The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91, LA-12740-M.
- MACFARLANE, R. E., 1999. READMEO.
- MAIORINO, J. R. et al., 2002. Management of spent fuel from research reactor in Latin America: A regional approach. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, RERTR2002, Argentina.
- MEDINA, E. G., NASSINI, H. E., 1990. Informe de diseño en condiciones normales de operacion de los elementos combustibles de bajo enriquecimiento (ECBE) normal y de control destinados al RA-3. CNEA, UPESN, IT-IEC 02/90, Argentina.
- MELE, I. et al., 1994. TRIGA Mark II benchmark experiment, part I: steady-state operation. Nuclear Technology, vol. 105, p 37-52.
- MELE, I., 1994. TRIGA computer package. Proceedings of the workshop on nuclear reactors Physics, Design and Safety; ICTP, Italy.
- MONDANEL, J. L., 2002. A New Generation in the Family of Packages for Transportation. In International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, RERTR2002, Argentina.

- MOORE, R. L. et al., 1995. MOCUP: <u>MCNP-ORIGEN2</u> Coupled <u>U</u>tility <u>Program</u>. Report INEL-95/0523, USA.
- MORIMOTO et al., 1988. Development of a fuel assembly analysis code VMONT using a vectorized Monte Carlo Method coupled with a burnup calculation. Proceedings of the 1988 International Reactor Physics Conference, ANS.
- NAITO, Y. et al., 1996. Burmup code for fuel assembly by Monte Carlo code: MKENO-BURN. Report JAERI 96037, Japan.
- NEA, 1999. International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments. NEA, Paris.
- NETO, M. M., MOURÃO, R. P., 2002. Regional dual-purpose cask for the storage and transport of research reactor spent fuel. International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, RERTR2002, Argentina.
- NOTARI C., CALABRESE R., 1995. Introducción de un EC prototipo con siliciuro de uranio en el RA3. CNEA, Centro Atómico Constituyentes, Argentina.
- ORNL, 2000. SCALE4.4A, eletronic manua.1 Oak Ridge National Laboratory, ORNL/RSICC, USA.
- ORNL, 2004. SCALE5 eletronic manual. Oak Ridge National Laboratory, ORNL/RSICC, USA.
- PAIANO, M. C., RESENDE, M. F. R., 1995<sup>a</sup>. Medidas necessárias para validação de cálculo do reator IPR-R1. CDTN/CNEN, Belo Horizonte, NI AT4-014/95.
- PAIANO, M. C., RESENDE, M. F. R., 1995<sup>b</sup>. *Planejamento de medidas de reatividade no reator IPR-R1*. Belo Horizonte, CDTN/CNEN, NI AT4-017/95.
- PEREZ E. E., 1995. Descripción del prototipo ECBE de 19 placas combustibles para irradiación en el RA-3. CNEA, Departamento Combustibles Nucleares, Argentina.
- PERSIC, A., SLAVIC, S., 1995. TRIGLAV A computer program for research reactor core management calculations. Proceedings of the 2<sup>nd</sup> Regional Meeting on Nuclear Energy in Central Europe, Slovenia.
- PERSIC, A. et al., 2000. TRIGA Mark II criticality benchmark experiment with burned fuel. Nuclear Technology, vol. 132, p 325-337.
- POLASTRO, L. C., 1980. Estimativa das Queimas Individuais e do Excesso de Reatividade do Núcleo do TRIGA IPR RI, NUCLEBRAS/CDTN, Nota Técnica LABRE.PD 002.
- POSTON, D. L., TRELLUE, H. R., 1999. User's manual, version 2.0 for MONTEBURNS, version 1.0. LANL, report LA-UR-99-4999.
- RAVNIK, M., 1994. Principles and physical models of research reactor calculations. Proceedings of the workshop on nuclear reactors – Physics, Design and Safety, ICTP, Italy.
- REARDEN, B. T., 1995. Engineering analysis of a power upgrade for the Texas A&M Nuclear Science Center Reactor, Texas A&M University, Thesis (MSc).
- RODRIGUES, C. W., 1972. Aspectos de radioproteção e segurança nuclear relativos à ampliação da potência do reator IPR – R1 para 250 kW. Belo Horizonte, UFMG, IPR/CNEN, Dissertação (Mestrado).

- RUGGIRELLO, G. et all., 2002. Desarrollo de un sistema versátil para la caracterización del quemado de los elementos combustibles tipo placa. CNEA, UACN, Argentina.
- SILVA, V. M. A., 1971. Anteprojeto de ampliação da potência do reator IPR R1. Belo Horizonte, UFMG, IPR/CNEN, Dissertação (Mestrado).
- SOUZA, R. M. G. P., RESENDE, M. F. R., 1996. *Medidas de reatividade do reator TRIGA IPR - R1*. CDTN/CNEN, Belo Horizonte, NI-AT4-009/96.
- SOUZA, R. M. G. P., RESENDE, M. F. R., 1997. Medidas de reatividade de elementos combustíveis do reator TRIGA IPR-R1. CDTN/CNEN, Belo Horizonte.
- SOUZA, R. M. G. P. et al., 2001. Resultados dos testes iniciais para o aumento de potência do reator TRIGA IPR-R1. CDTN/CNEN, NI-IT4-01/01.
- SPANIER, J., GELBARD, E. M., 1969. Monte Carlo principles and neutron transport problem. Adisson-Wesley, New York.
- STUART, I. F., 1991. The development of a transportable storage cask. Int. J. Rad. Mat. Transp, v. 2, n. 1/3, p. 41-46.
- THAMM, G., 1999. Disposal of irradiated fuel elements from German research reactors status and outlook. International Conference on Research Reactor Fuel Management, RRFM'99.
- THOMASSON, J., 2000. *RTR spent fuel treatment and final waste storage*. International Conference on Research Reactor Fuel Management, RRFM2000, France.
- USDOE, 2002. Safety analysis report for the RH-TRU 72-B waste shipping package. Rev.3.
- USNRC, 2004. Packaging and transportation of radioactive material. Code of Federal Regulations, Title 10, Chapter I, Part 71.
- VELOSO, M. A., 1999. Análise Termo-hidráulica do reator TRIGA IPR-RI a 250 kW. Belo Horizonte, CDTN/CNEN, NI-CT4-03/99.
- YAMAGUCHI, M., 1995. Projeto do núcleo do IEA-R1 5MW. IPEN/CNEN, RELT.001.R00.
- YAMAGUCHI, M., 1996. Análise neutrônica do múcleo do reator IEA-R1 para 5MW. IPEN/CNEN, RELT.002.R00.
- YAMAGUCHI, M., 1997. Validação da metodologia de cálculo neutrônico do reator IEA-R1. IPEN/CNEN, RELT.011.R00.

 $AP\hat{E}NDICE I$  – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

## BENCHMARK MEASUREMENTS AND CALCULATIONS OF U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-AI MTR FUEL PLATES WITH BURNED FUEL

Hugo M. Dalle<sup>1, 3</sup>, Gabriel R. Ruggirello<sup>2</sup>, Guillermo Estryk<sup>2</sup>, Alejandro Stankevicius<sup>2</sup>, Daniel A. Gil<sup>2</sup>, Jorge A. Quintana<sup>2</sup>, Miguel Sanchez<sup>2</sup>, Claudio A. Devida<sup>2</sup>, Elias B. Tambourgi<sup>3</sup>, T. Cuya<sup>4</sup>, Robert Jeraj<sup>5</sup>, Jorge Medel<sup>6</sup>, Octavio Mutis<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Centro de Desenvolvímento da Tecnologia Nuclear – CDTN/CNEN Caixa Postal 941, CEP 30123-970 – Cidade Universitária Pampulha, Belo Horizonte, Brazil

<sup>2</sup>Comisión Nacional Energía Atómica. Av. Libertador 8250. – 1429 – Buenos Aires, Argentina

Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP Cidade Universitária "Zeferino Vaz", Caixa Postal 6066 - CEP 13081-970 – Campinas, Brazil

<sup>4</sup>Instituto Peruano de Energía Nuclear Av. Canadá 1470 – Lima 41, Lima, Perú

<sup>5</sup> Jozef Stefan Institute Jamova 39, 1000 Ljubljana, Slovenia

<sup>6</sup>Comisión Chilena de Energía Nuclear Av. Nueva Bilbao, 12501, Comuna de Las Condes, Santiago, Chile

#### ABSTRACT

Experimental and calculated results of burnup of a MTR fuel assembly irradiated at the Ezeiza Atomic Center research reactor RA-3, Buenos Aires, Argentina, are presented. Two fuel plates among the nineteen that compose a silicide-based Low Enriched Uranium (LEU) fuel assembly were analyzed. Burnup of these two fuel plates was experimentally determined by destructive chemical analyses through the measurement of U-235 depletion using mass spectrometry. In addition, relative burnup profile had been previously evaluated in both plates by gamma scanning spectroscopy using Cs-137 activity as a burnup monitor. This profile was used to select locations of the samples for destructive analysis. Burnup calculations were performed using two different methodologies. With the first method a unit cell calculation of the effective cross sections with the WIMS code was combined with the CITATION diffusion code. The second method was based on the MONTEBURNS calculation, where the burned fuel isotopic vector is calculated with the ORIGEN code and automatically linked to the MCNP Monte Carlo transport code. The results obtained with different methodologies agreed within 6% with the U-235 depletion measurements.

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

## 1. INTRODUCTION

The IAEA Technical Cooperation Project RLA/4/018 "Management of Spent Fuel from Research Reactors" started in 2001. It constitutes a joint effort of Latin American nuclear institutions from Argentina, Brazil, Chile, Mexico, and Peru to accomplish the following objectives: "to define the basic conditions for a regional strategy for managing spent fuel which will provide solutions that are in the economic and technological realities of the countries involved, and in particular, to determine what is needed for the temporary wet and dry storage of spent fuel from the research reactors in the countries of the Latin American region".

Such work gets considerable importance since the USA spent fuel take-back program will be end in May, 2006. After that the Latin American research reactors operators will need to identify and assess all possible options to deal with their spent fuel by themselves.

Part of the project consists of the characterization of the spent fuel through reactor calculations since this is the easiest way for determining fuel burnup and moreover, it does not interfere with reactor operation. In order to improve and check the burn up calculation methodologies in the different countries of the region a burnup benchmark experiment was initiated. The experiments were performed on a MTR prototype fuel assembly, called the test P04, irradiated in the Argentinean RA-3 research reactor. This prototype has been tested as a part of the qualification program of the LEU (19.7% U-235) and high-density meat silicide-based fuel. The Argentine Nuclear Energy Commission (CNEA) performed the experiments in the hot cell facilities and then shared the results with other participant countries, to perform calculations using the methodologies and codes typically used for such analyses in their home countries. The burnup was determined through destructive chemical analysis, measuring the U-235 depletion by mass spectrometry. Two plates, one inner and one outer, of the nineteen that constituted the fuel assembly were analyzed to evaluate the burnup.

The geometry and material data of the reactor and core components that are relevant for benchmark calculations are given in the next section. Further details can be found in Refs. 1 to 6.

### 2. GEOMETRY AND MATERIAL DATA OF THE RA-3 RESEARCH REACTOR

The RA-3 is a typical Material Testing and Research Reactor (MTR) located at Ezeiza Atomic Center in Buenos Aires, Argentina, built and operated by CNEA. It is a tank reactor, moderated and cooled with light water. Currently, the reactor operates at 10 MW thermal power. However, when the test P04 fuel assembly was in the core, the reactor power was kept at 5 MW. The RA-3 core grid has 80 locations in which different core configurations can be formed. Only the components shown in Figure 1 were considered in the calculation models described below. Other components placed in the grid are considered outside the core and estimated to have a negligible effect on the investigated parameters.

All the fuel assemblies are of the MTR box plate type. During the test P04 irradiation period the RA-3 core was constituted of 27 LEU fuel elements. Figure 1 shows the core configuration at the beginning of the test P04 irradiation. The core was formed with the test P04, 22 standard fuel assemblies and 4 control fuel assemblies. Both, the standard fuel and control fuel assemblies have the  $U_3O_8$ -Al fuel meat matrix with the aluminum-6061 cladding, and contain 19 and 14 fuel plates, respectively.

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.



The control rods have the absorber plates made of Ag-In-Cd alloy with the SS-316 cladding. The test P04 was an unique assembly in the core with  $U_3Si_2$ -Al fuel meat matrix and aluminum 6061 cladding and contains 19 fuel plates. The RA-3 core also has 5 open aluminum irradiation boxes that can be filled with samples for irradiation. Outside the core there are 23 graphite blocks that work as a reflector. The geometric dimensions and materials data of all components of the core are given in Figs. 2 to 6 and in tables I and II.

 $AP \hat{E} NDICE I$  – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MIR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.



7.7 Figure 3. Test P04 fuel assembly. Dimensions are in cm.

6.6

 $AP \hat{E}NDICE I$  – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.



Figure 4. RA-3 control fuel assembly Dimensions are in cm.



Figure 5. RA-3 graphite element

Figure 6. MTR fuel assembly

 $AP \hat{E}NDICE I$  – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

Graphite Assembly Length $7.0$ $\%idth$ Graphite ( $\rho = 1.78 \text{ g/cm3}$ )Width $6.8$ HeightHeight $67.5$ Cladding thicknessO.3Aluminum 6061Standard Fuel Plates Meat Zone ThicknessU308-Al matrixThickness $0.07$ WidthWidth $6.0$	Component	Dimension (cm)	Material
Length7.0Width6.8Height67.5Cladding thickness0.3Aluminum 6061Standard Fuel PlatesMeat ZoneU308-Al matrixThickness0.07Width6.0	Graphite Assembly		Graphite ( $\rho = 1.78 \text{ g/cm3}$ )
Width6.8Height67.5Cladding thickness0.3Aluminum 6061Standard Fuel PlatesMeat ZoneU308-Al matrixThickness0.07Width6.0	Length	7.0	
Height67.5Cladding thickness0.3Aluminum 6061Standard Fuel PlatesU308-Al matrixMeat ZoneU308-Al matrixThickness0.07Width6.0	Width	6.8	
Cladding thickness0.3Aluminum 6061Standard Fuel PlatesU308-Al matrixMeat ZoneU308-Al matrixThickness0.07Width6.0	Height	67.5	
Standard Fuel PlatesU308-Al matrixMeat Zone0.07Thickness0.07Width6.0	Cladding thickness	0.3	Aluminum 6061
Meat ZoneU308-Al matrixThickness0.07Width6.0	Standard Fuel Plates		
Thickness0.07Width6.0	Meat Zone		U308-Al matrix
Width 6.0	Thickness	0.07	
	Width	6.0	
Height 61.5	Height	61.5	
Cladding thickness 0.04 Aluminum 6061	Cladding thickness	0.04	Aluminum 6061
Plates Height 65.5	Plates Height	65.5	
Others as figure 2	Others	as figure 2	
Control Fuel Plates as figure 4	Control Fuel Plates	as figure 4	
Meat Zone U308-Al	Meat Zone		U308-A1
Thickness 0.07	Thickness	0.07	
Width 6.0	Width	6.0	
Height 61.5	Height	61.5	
Cladding thickness 0.04 Aluminum 6061	Cladding thickness	0.04	Aluminum 6061
Plates Height 65.5	Plates Height	65.5	
Control Rods Guide Plates as figure 4 SS AISI 316/304	Control Rods Guide Plates	as figure 4	SS AISI 316/304
Absorber Zone (not shown in fig. 4) Ag (80%)-In (15%)-Cd (5%)	Absorber Zone	(not shown in fig. 4)	Ag (80%)-In (15%)-Cd (5%)
Thickness 0.26	Thickness	0.26	
Width 6.3	Width	6.3	
Height 64.8	Height	64.8	
Cladding thickness 0.05 SS AISI 316	Cladding thickness	0.05	SS AISI 316
Test P04 Fuel Plates	Test P04 Fuel Plates		
Meat Zone U-Sia-Al	Meat Zone		U-Si-Al
Thickness 0.054	Thickness	0.054	03012 233
Width 60	Width	60	
Height 60.0	Height	60.0	
Cladding thickness 0.038 Aluminum	Cladding thickness	0.038	Aluminum
Plates Height 65.5	Plates Height	65.5	<pre>4 ####################################</pre>
Others as figure 3	Others	as figure 3	
Irradiation Box Water	Irradiation Box	č	Water
Lenoth 75	Lenoth	75	
Width 71	Width	71	
Height 675	Haight	67 5	
Cladding thickness 0.3 Aluminum	Cladding thickness	03	Aluminum

## Table I. Dimensions and materials data

APENDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

		ations of the fact.	
Composition	Standard Fuel Assembly (19 plates)	P04 Fuel Assembly (19 plates)	Control Fuel Assembly (14 plates)
Mass of U <sub>3</sub> O <sub>8</sub> (g)	1743.2		1284.5
Mass of $U_3Si_2$ (g)		1827.8	AUX-000-000
Mass of Uranium (g)	1475.7	1727.3	1087.4
Mass of U-235 (g)	290.7	340.29	214.2
Mass of Aluminum (g)	626.1	421.0	461.3
Enrichment (wt. %)	19.7	19.7	19.7
Meat Density (g/cm <sup>3</sup> )	4.8	6.13	4.8

Table II. Compositions of the fuel.

#### **3. BURNUP HISTORY**

The test P04 fuel assembly was inserted in the RA-3 core on April 23, 1996 (core configuration N° 53) and removed on October 27, 1997 (core configuration N° 71). During this time P04 was moved in the core twice, from the initial position I2 to I3 and from I3 to F6. It should be emphasized that the core 53 was not a fresh core, which introduces uncertainties in the P04 burnup calculations. This problem was tried to be minimized by accounting for the core burnup as determined by reactor operators (see Table III). Furthermore, Table IV gives the operation steps for each configuration between the core configurations N° 53 and 71, when the test P04 fuel assembly was in the core.

Location of the Assembly	Initial Burnup (%U-235)	Location of the Assembly	Initial Burnup (%U-235)
D3	32.5	G3	4.0
D4	30.3	G5	10.9
D5	41.0	<b>G</b> 6	35.8
<b>D</b> 6	37.2	<b>G</b> 7	42.0
<b>E</b> 2	39.4	H2	35.1
E3	17.7	H3	22.4
E4	25.4	H4	13.2
E5	17.1	H5	21,5
F2	35.4	H6	43.5
<b>F</b> 3	45.3	12	0.0
F4	16.1	I3	40.3
F5	28.8	I4	32.8
F6	29.9	I5	39,5
F7	36.5		

Table III. Calculated burnup distribution for core Nº 53.

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

Core	P04	Date		Burnup Step
Number	Location	BOC	EOC	(days)
53	12	96/April	96/May	7.92
54	12	96/May	96/Jun	31.97
55	I2	96/Jun	96/Aug	28,76
56	I2	96/Aug	96/Sept	24.7
57	I3	96/Sept	96/Oct	13.76
58	I3	96/Oct	96/Oct	13.82
59	I3	96/Oct	96/Nov	18.62
60	I3	96/Nov	97/Feb	19.12
61	I3	97/Feb	97/Feb	4.02
62	I3	97/Mar	97/Mar	16,63
63	I3	97/Mar	97/Apr	20.74
64	13	97/May	97/May	7.99
65	I3	97/May	97/May	3.98
66	13	97/May	97/May	3.38
67	I3	97/May	97/Jul	19.67
68	I3	97/Jul	97/Aug	19.85
69	<b>F</b> 6	97/Aug	97/Sept	16.71
70	F6	97/Sept	97/Oct	15,57
71	F6	97/Oct	97/Oct	12.7

Table IV. Burnup steps of P04 irradiation.

#### **4. EXPERIMENTAL RESULTS**

On May 18, 2000, the test P04 fuel assembly was transported to the hot cell at Ezeiza Atomic Center for the post-irradiation examinations. After visual and dimensional inspection of the entire element, P04 was dismantled and all the plates were carefully inspected. Some plates were selected for thickness measurements, gamma scanning and volume measurement by the immersion method. One inner and one outer plate were also tested for blister threshold temperature and behavior of the meat clad bonding. The other two outer and inner plates that were gamma scanned were also selected for destructive examination to obtain samples for microstructural observation and chemical burnup analyses. The discussion here will be restricted to the gamma scanning and the destructive analyses for obvious reasons.

#### 4.1. Plate gamma scanning

The inner N° 9 and outer N° 19 plates were used for gamma scanning. The plates were moved on a track in front of a collimator. This consists of a hole with 2 mm diameter and 150 mm long, made in a Pb block. The high resolution HP Ge detector was installed at a distance of 3 meters from the collimator to avoid the incidence of scattered rays. Gamma energy spectra were obtained at intervals of 1 cm, along the axial and transverse center lines of the plates. The main peaks found, in decreasing order of intensity, are Cs-137, Ce-144, Pr-144 and Cs-134, as shown in Figure 7.

Both profiles, axial and transverse, can be obtained from the net area under the corresponding peak in each measurement. Figure 8 shows the gamma activity axial profile normalized with respect to the maximum value for the four nuclides mentioned above for the plate N° 19. The square root of the Cs-134 activity accounts for the fact that a double neutron capture is needed for its information. This figure also includes the normalized values of the axial thermal neutron fluxes measured during irradiation of P04, obtained by the foil activation method. A good agreement between the profile shape and the foil activation data is observed for all the nuclides.

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.



Figure 7. Gamma spectrum obtained at the maximum activity position for outer plate Nº 19.

The form-factor  $Count_{max}/Count_{average}$  of the center line axial profile, with the average value calculated from the integral of the values in each measurement interval, is 1.30 to 1.33 for plates N<sup>o</sup> 9 or N<sup>o</sup> 19, respectively, and for all the nuclides considered. However, for our analyses the results of Cs-137 are used, as this nuclide is recognized to be the one that best reflects the U-235 depletion profile in the fuel plate.



Figure 8. Normalized gamma activity axial profile for the main peak.

APÉNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3S_{12}$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

Figure N° 9 shows the Cs-137 activity axial profile for both plates, normalized to the maximum value. The meat position along the length of the plate can be clearly seen, as well as a very significant effect of active material accumulation during manufacturing of the plate, "dog boning effect" at the both plate ends, which is shown by large activity peaks. It is consistent with the maximum area loading of about 28% estimated for the manufacturing process for these plates. The fact that this effect could be detected in a very narrow zone, indicates the effectiveness of the collimating arrangement.

COMPARATIVE NORMALISED PROFILE FOR 137Cs PEAK



Figure 9. Normalized Cs-137 activity axial profile for both plates.

The Cs-137 activity profile was the main guide for the selection of the places where the puncturing will be performed to obtain samples for destructive analysis.

Figure N° 10 shows the Cs-137 activity transverse profile at maximum axial activity for both plates, in comparative counts for the same counting conditions. The end peak effect caused by the different neutron thermal flux in the assembly box, decreasing from the edge to the center of each plate and from the outer to the inner plate, can be noticed.

 $AP\hat{E}NDICE I$  – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

Comparative count peak Cs137



Figure Nº 10. Relative Cs-137 activity transverse profile for both plates.

#### 4.2. Destructive analyses

Appropriate size of samples for destructive analysis were obtained by puncturing dies driven by a manual hydraulic pump. Seven equi-spaced 4x4 mm samples are bound for chemical burnup analyses along the axial center line and one sample close to the meat edge, of both, the inner plate  $N^{\circ}$  9 and the outer plate  $N^{\circ}$  19 (see figure 11). The purpose is to evaluate the burnup distribution along the entire fuel plate and then, to have the best estimation of the average burnup.



Figure 11. Locations of the samples punctured for chemical burnup analyses.

The samples were processed by the acid dissolution and ion-chromatographic separation [7]. The isotopic analyses was performed on an appropriate aliquot of the solution. The thermo-ionization mass spectrometry was used, calibrated with the 15% enriched U-235 (U-150 NIST) standard. Isotopic composition of uranium was determined to evaluate the local depletion of U-235 as an indicator of burnup.

 $AP\hat{E}NDICE I$  – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

Table V shows the obtained values of burnup distribution (%U-235 depletion) in both plates and figure 12 plots these values. The results reveal a higher burnup of the outer plate (N° 19) and also a higher burnup at the edge of the meat than at the center line. These variations show the influence of the neutron thermal flux distribution in the RA-3 reactor fuel.

	278 Arten	Inner pl	ate N° 09	
	Center	r Line	Meat Ed	ge Line
Axial Position	Isotopic comp.	Depleted	Isotopic comp.	Depleted
(cm from top)	U-235 (wt.%)	(% U-235)	U-235 (wt.%)	(% U-235)
7	17.22	12.81%		
15	16.24	17.77%		
23	15.63	20.86%		
31	15.54	21.32%	14.71	25.52%
39	15.66	20.71%		
47	16.21	17.92%		
55	17.29	12.46%		
Average				18.2%
		Outer p	late Nº 19	
	Cente	r Line	Meat Ed	ge Line
Axial Position	Isotopic comp.	Depleted	Isotopic comp.	Depleted
(cm from top)	U-235 (wt.%)	(% U-235)	U-235 (wt.%)	(% U-235)
7	16.52	16.35%		
15	15.53	21.37%		
23	14.87	24.71%		
31	14.61	26.03%	13.89	29.67%
39	14.83	24.91%		
47	15.49	21.57%		
55	16.66	15.65%		
Average				22.2%

Table V. Burnup distribution for plates N° 9 and N° 19 (mass spectrometry). The initial enrichment of the fuel was 19.75 wt.%. The average was estimated including the thermalization effect in the meat edge.

The normalization process from point burnup results to the average in the whole plate was done by a simple geometric normalization procedure. It leads to the average values of 18.2% and 22.2% of depleted U-235 for plates N° 9 and N° 19, respectively. Due to the relatively low amount of point samples taken from the plates no estimation of the normalization accuracy was done, nevertheless, it is expected to be lower than the accuracy of the mass spectrometry process. Currently, further experiments are scheduled to take and measure more samples from the plates in order to improve the normalization and to estimate the associated uncertainties.

APÉNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

In the same samples, the Nd-148, total U and Pu concentrations were also analyzed in order to obtain an exact evaluation of the percentage of the fissioned heavy metal (HM) regarding to the total pre-irradiated HM.



Figure 12. Burn-up distribution for plates 09 and 19.

## 5. CALCULATION RESULTS

#### 5.1. Monte Carlo

Due to the increased speed of computers, use of Monte Carlo methods for burnup calculations is becoming more practical. The MONTEBURNS [8] code, tested before for the TRIGA fuel [9] was used for this purpose. The code is a fully automated tool that links the Monte Carlo transport code MCNP [10] with the radioactive burnup and decay code Origen2.1 [11]. The main function of Monteburns is to transfer one group cross-section and neutron flux values from MCNP to Origen and then transfer the resulting material compositions after irradiation and/or decay from Origen back to MCNP. The number of these iterations is defined by the user. The code system is able to supply quantitative information about the  $k_{eff}$  as a function of the irradiation time (burnup), mass of practically almost all fission products and transuranic elements produced and/or removed from the system, radionuclides activity, heatload, ingestion and inhalation radiotoxicity. All the standard information supplied by Origen and MCNP like criticality, neutron spectrum, etc, can be obtained with just few system modifications.

The calculations were performed with the *kcode* option in MCNP. Water temperature was assumed 23 °C. No temperature corrections were applied to the MCNP cross-section data. 5000 neutrons per cycle and 800 cycles, skipping the 50 first cycles were used. The material cross-sections from ENDF/B-VI continuos-energy library were used whenever possible. The ENDF/B-V library was used for those fission products not available in the ENDF/B-VI library.

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

A burnup history, as shown in table IV, was simulated. The core 53 was assumed to be at the beginning of life (BOL), which means that all fuel assemblies were assumed fresh. No shuffling of the fuel assemblies in the cores was considered, except the P04 fuel assembly position changes that occurred from cores N° 56 to N° 57 and N° 68 to N° 69.

The cores were irradiated at constant and continuous power of 5 MW until the requested burnup was achieved. The whole burnup of the cores was divided in three burnup steps – from cores N° 53 to N° 56; N° 57 to N° 68; and N° 69 to N° 71 – just following the position changes of P04 assembly. After that, a 5 year decay time was considered. The library Thermal.lib was used in the Origen2.1 calculations of the isotopic compositions.

The following nuclides (fission products and transuranic elements) were considered "important" in the simulation: Xe-135, Sm-149, Sm-151, Pu-239, Nd-143, U-236, Pm-147, Rh-103, Xe-131, Cs-133, Tc-99, Nd-145 and Pu-240. Beside these nuclides, also the elements with atom fraction, weight fraction, fraction of absorption and/or fraction of fission in the overall material greater than 0.0001 were automatically considered important by Monteburns.

#### 5.1.1. Results

Results of burnup simulation for test P04 fuel assembly are presented in Table VI. It presents the burnup and mass contents of U-235 for fuel plates N° 9, N° 19 and the total for P04 assembly, which allows direct comparison with the experimental values presented in the previous section.

	Initial mass of U-235 (grams)	Mass of U-235 after burning (grams)	Depleted Uranium (%U-235 burned)
Plate Nº 9	17.91	14.5	19.0
Plate Nº 19	17.91	14.2	20.7
Total of P04 (19 plates)	340.29	273.83	19.5

Table VI. Average calculated (Monteburns) burnup.

After 5 years of cooling time considered in the burned fuel simulation of the test P04 assembly the activity has a strong contribution of the fission products Pm-147, Cs-137 and Cs-134. Nuclides with atomic mass equal 144 were not evaluated (they are not in the MCNP4B library), and therefore comparison with other fission products detected in the gamma scanning like the Ce-144 and Pr-144 was not possible.

#### 5.2. Diffusion

In parallel to the Monte Carlo burnup calculation, the burnup using the unit cell calculation of the macroscopic cross sections combined with a neutron diffusion code was also employed. The inhouse developed Peruvian code WIMCIT was used for this purpose. This code uses WIMS [12] and CITATION [13] to perform fuel management of a MTR reactor with a mixed core. It is capable of performing two- as well as three-dimensional calculations

The methodology is based on the WIMS code for cell calculations in order to obtain macroscopic cross sections (see Figure 13). They are calculated in 18 groups and then collapsed to 4 groups in the range from 0.0 to 10.0 MeV with the following energy cut-offs: 0-0.625eV, 0.625eV-15.03keV, 15.03keV-1.35MeV, 1.35MeV-10MeV.

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

The problem dependent library is created as function of the irradiation to be subsequently used in the diffusion calculation. For the diffusion calculation the CITATION code is used. The main calculation steps are described in Figure 14.



Figure 13. Cell calculation methodology.

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of U<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>-Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.



Figure 14. Diffusion calculation methodology.

In this model the core was divided into 21 planes, 13 of them in the active length (meat zone), and each plane was divided into 190 zones. Since the meat zone heights are different for P04 and standard fuel assemblies the density of  $U_3Si_2$  fuel in the P04 fuel was changed to compensate for the lower value of the meat zone. In this way the dimensions were preserved in the diffusion model. Since the fuel elements do not have the same weight of U-235, a virtual burn up was defined in each element, to compensate for small differences in weight of U-235 and to start with the same composition. The calculation started using burn up data provided by CNEA for the core 53, which leads to an additional error .

#### 5.2.1. Results

The total burn-up for the P04 fuel assembly for each core configuration is shown in Table VII. WIMCIT also calculates the burnup profile, which in this case results in 13 planes in the meat zone of 615 mm. The first plane is located at 2.365 cm, the second at 7.095 cm, etc. The burn-up value is accumulated for each partial calculation in a burnup library. This model used a fine mesh therefore allowing to calculate density power in every plate. The burnup profile for the plate N° 9 of the P04 fuel assembly is given in Figure 15.Table VIII gives the average burnup for both plates, N° 9 and 19.

 $AP\hat{E}NDICE I$  – Benchmark Measurements and Calculations of  $U_3Si_2$ -Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

Com	MUU/Ton	Depleted Uranium
Core	IVI W d/ I ON	(%0-233 burned)
53	911.9	0.58
54	4036	2.56
55	6764.7	4.28
56	9116.9	5.77
57	10721.5	6.79
58	12374.1	7.84
59	14614.2	9.25
60	16871.1	10.68
61	17331.8	10.98
62	18757.7	11.88
63	21626.3	13.69
64	22539.6	14.27
65	22996.3	14.56
66	23385.2	14.81
67	25604.3	16.21
68	27829.5	17.62
69	30740.9	19.47
70	33411.1	21.16
71	36649.2	23.21

Table VII. Burnup calculated for the P04 in each RA-3 core.

Table VIII. Average burnup calculated for the fuel plate  $N^{\circ}$  9 and  $N^{\circ}$  19.

Plate	(%U-235 burned)
N° 9	17.0
<u>Nº 19</u>	20.9

APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.



Fig. 15. Calculated burnup distribution for plate Nº 09.

#### 6. CONCLUSIONS

The burnup of two fuel plates, among the nineteen that compose a silicide-based Low Enriched Uranium (LEU) of a MTR fuel assembly was experimentally determined by destructive chemical analyses through the measurement of U-235 depletion using mass spectrometry. The relative burnup profile had been previously evaluated in both plates by gamma scanning spectroscopy using Cs-137 activity as a burnup monitor. This profile was used to select the location of the samples for destructive analysis. In addition, burnup calculations were performed using two different methodologies. With the first method a unit cell calculation of the effective cross sections with the WIMS code was combined with the CITATION diffusion code. The second method was based on the MONTEBURNS calculation, where the burned fuel isotopic vector is calculated with the ORIGEN code and automatically linked to the MCNP Monte Carlo transport code.

Seven equi-spaced samples for chemical burnup analyses were taken along the axial center line and one sample close to the meat edge of both plates. The purpose was to evaluate the burnup distribution along the fuel plates and to estimate the average burnup for the entire plates. The average burnup for the whole plate was done by a simple geometrical normalization procedure.

Monte Carlo and diffusion burnup calculations have shown good agreement with the experimental values. The average experimental burnup for plates N° 9 and N° 19 was estimated 18.2% and 22.2% of U-235 depleted, respectively. The Monte Carlo calculation gave 19.0% and 20.7%, while the diffusion calculation gave 17.0% and 20.9%. The comparison between these results shows that calculation agrees within approximately 6% with the measurements.

#### **ACKNOWLEDGEMENTS**

The authors acknowledge the support of the International Atomic Energy Agency (IAEA) through the project RLA/4/018 which make possible the accomplishments here described. Such support has strongly contributed to the development of the Latin America strategy for management of the research reactors spent fuel. APÊNDICE I – Benchmark Measurements and Calculations of U<sub>3</sub>Si<sub>2</sub>-Al MTR Fuel Plates With Burned Fuel. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.

## REFERENCES

[1] RUGGIRELO G., CALABRONI H., SANCHEZ M., ZAWERUCHA A., Desarrollo de un Sistema Versátil para la Caracterización del Quemado de los Elementos Combustibles tipo Placa. CNEA, UACN, Argentina.

[2] MEDINA E. G., NASSINI H. E. Informe de Diseno en Condiciones Normales de Operacion de los Elementos Combustibles de Bajo Enriquecimiento (ECBE) Normal y de Control Destinados al RA-3. CNEA, UPESN, IT-IEC 02/90, Argentina.

[3] GOMEZ J., Propuesta de Irradiacion en el RA-3 de EC placa de Bajo Enriquecimiento con Siliciuros de Uranio. CNEA, Division ECRI, Departamento Combustibles Nucleares, Argentina.

[4] PEREZ E. E., Descripción del Prototipo ECBE de 19 Placas Combustibles para Irradiacion en el RA-3. CNEA, Departamento Combustibles Nucleares, Argentina.

[5] CNEA, Fabricación EC Prototipo 04 de Alta Carga de U3Six/Al. Departamento Combustibles Nucleares, Division ECRI, Argentina.

[6] NOTARI C., CALABRESE R., Introducción de un EC Prototipo com Siliciuro de Uranio en el RA3. CNEA, Centro Atomico Constituyentes, Argentina, 1995.

[7] DEVIDA C., GAUTIER E., GIL D., STANKEVICIUS A., The LFR Facility (CNEA) for Burnup Determination in Uranium Silicide Fuels 20% <sup>235</sup>U. RERTR 2002, Bariloche, Argentina.

[8] POTTON D.I. and TRELLUE H. R., User's Manual, Version 2.0 for Monteburns Version 1.0, LA-UR-99-4999 (September 1999).

[.9] DALLE H. M. and JERAJ R., Validation of the Monteburns Code for Criticality Calculations of Triga Reactors. XIII ENFIR, INAC 2002, Rio de Janeiro, Brazil, 2002.

[10] BRIESMEISTER J. F., MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4B, LA-12625-M, 1997.

[11] CROFF A. G., A User's Manual for the ORIGEN2 Computer Code. ORNL/TM-7175, 1980.

[12] AHNERT, I., Programa WIMS-TRACA para el calculo de elementos combustibles. Manual de usuario y datos de entrada, Junta de Energia Nuclear; Madrid, 1980.

[13] FOWLER et all. Nuclear Reactor Core Analysis Code: CITATION. Oak Ridge National Laboratory. July 1969.

APÊNDICE II – Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR – RI Research Reactor Using Monteburns Code. In: International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Argentina, 2002.

## Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR – R1 Research Reactor Using Monteburns Code

Hugo Moura Dalle<sup>1, 3</sup>, Robert Jeraj<sup>2</sup> and Elias B. Tambourgi<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN/CNEN Caixa Postal 941 – Cidade Universitária – Pampulha 30123-970 – Belo Horizonte/MG - Brazil

> <sup>2</sup>Jozef Stefan Institute Jamova 39, 1000 Ljubljana Ljubljana/Slovenia

<sup>3</sup>Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP Cidade Universitária "Zeferino Vaz" Caixa Postal 6066 - CEP 13081-970 – Campinas/SP - Brazil

#### ABSTRACT

Monteburns is a completely automated computational tool that links the Monte Carlo code MCNP with the burnup and decay code Origen2.1. This code system was used to simulate the core of the CDTN's TRIGA research reactor and nowadays is the current methodology used for the theoretical analysis of the main neutronic parameters of such reactor. Some results of the characterization of the burned fuel elements inside the core will be presented, including the mass of transuranic elements and of some fission products, the activity, heatload and radiotoxicities of the fuel. Furthermore, the core excess reactivity and control rods reactivity worth of the reactor after the power upgrading to 250 kW as well as the axial and spectral distribution of the neutron flux in the main irradiation devices were calculated.

#### **1. INTRODUCTION**

The utilization of Monte Carlo transport methods to simulate nuclear reactors is becoming a practical option due to the increasing processing power of the computers. Burnup calculations of nuclear fuel, in spite of still being very slow, can already be carried out. That was the main reason for CDTN (Center for Nuclear Technology Development), Belo Horizonte, Brazil, to abandon the previous neutronic calculation methodology of its research reactor (TRIGA IPR – R1), based on WIMS [1] and CITATION [2] codes and replace it with the Monte Carlo transport based calculations.

The Monte Carlo based neutronic calculation methodology utilizes three codes: Monteburns [3], MCNP4B [4] and Origen2.1 [5, 6]. MCNP is a widespread Monte Carlo transport code used for stochastic simulation and transport of particles like neutrons, photons and electrons. The calculations for burnup and decay of the radioactive materials is performed by Origen2.1. Linking of these two codes is performed by Monteburns, which is fully automated tool that transfers one-group cross sections and flux values from MCNP to Origen, and then, transfers the isotopic compositions of the materials back to MCNP after the burnup and decay calculation performed by

APÊNDICE II – Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR – RI Research Reactor Using Monteburns Code. In: International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Argentina, 2002.

Origen. Such process is repeated in a cyclic fashion. The validation of the system and calculation methodology [7] was performed using the benchmark experiments [8, 9] carried out at Jozef Stefan Institute TRIGA reactor from Ljubljana, Slovenia.

The Monteburns codes system is able to supply neutronic parameters like neutron fluxes,  $k_{eff}$ , power distribution, control rods reactivity worth, core excess reactivity, fission products poisoning, characterization of burned and spent fuel as well as all the standard tallies from MCNP. It is important to note that MCNP can be used for very complex geometries, which makes the codes system applicable to a large variety of systems using fissile materials.

The neutronic simulation of the IPR – R1 reactor for power upgrade from 100 kW to 250 kW using Monteburns system will be presented here. In order to achieve the new power it was necessary to add four new fuel elements to the previous core. The chosen 250 kW core configuration has 63 fuel elements (FE) composed of 59 original Al-clad elements and 4 fresh SS-clad fuel elements. Figure 1 shows this core configuration.

The neutron flux distribution (both, axial distribution and spectral) in the central thimble and rotary groove was calculated. In addition, excess reactivity and control rods reactivity worth were calculated and the burned fuel was characterized through mass of some fission products and actinides, heatlod, activity and radiotoxicities.



Figure 1. TRIGA IPR – R1 - core 250 kW.

#### 2. MODELING

The simulation considered evolution of the IPR - R1 core since the beginning of life until present. The assumed burnup and decay history was as follows:

• From 1960/11/06 to 1964/06/03: 56 fuel elements; burning 149 MWh at 30 kW reactor power, followed by 1152 days decaying.

- From 1964/06/03 to 1973/07/23: 57 fuel elements; burning 231 MWh at 100 kW reactor power, followed by 3181 days decaying.
- From 1973 to 1996: 58 fuel elements; burning 1224 MWh at 100 kW reactor power, followed by 7885 days decaying.
- From 1996 to 2002/May: 59 fuel elements; burning 196 MWh at 100 kW reactor power, followed by 2000 days decaying.
- 2002/May: 63 fuel elements (4 fresh fuel elements go in to core). 250 kW.

The assumption of constant and continuous burnup followed by a decay time after (also continuously) in each cycle is just an approximation. However, simulating power history step by step would be impractical because of the numerous startups, power level changes and shutdowns of the reactor. Such assumption as well as the uncertainty on the reactor thermal power calibration are the strongest sources of errors of the burned fuel characterization.

The effects of the nuclides over  $k_{eff}$  calculations for TRIGA reactors were verified [10] and they have shown that for small burnup on TRIGA fuel (less than 5%) it is enough to consider only the influence of Xe135, Sm149, Sm151, Pu239, Nd143, U236, Pm147, Rh103, Xe131, Cs133, Tc99, Nd145 and Pu240. Considering then that the average burnup of the fuel elements in IPR – R1 have less than 5% U235 burned only these nuclides were considered in the current simulation.

The excess reactivity, p, is calculated as follows

$$\rho = \frac{k_{eff} - 1}{k_{eff}}$$

and the control rods reactivity worth as

$$\Delta \rho = \frac{1}{(k_{\text{eff}_1})} - \frac{1}{(k_{\text{eff}_2})}$$

where,  $k_{eff_1}$  and  $k_{eff_2}$  are, effective neutron multiplication factor of the cores with the control rod fully inserted and fully withdrawn.

The shutdown margin is given by the difference between the reactivity worth of the considered control rods (the most worthy rod is assumed fully withdrawn) and the excess reactivity. The calculation model considers the shadowing effect of the Safety and Regulating rods.

The error of the MCNP geometry model is estimated to be within 500 pcm and is mostly due to uncertainties on material composition specifications and simplifications of geometry [12]. The errors attributed to the power history and to the reactor thermal power calibration were not evaluated.

APÊNDICE II – Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR – RI Research Reactor Using Monteburns Code. In: International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Argentina, 2002.

In MCNP part of the calculation the ENDF/B-VI and ENDF/B-V cross section data was used, based on the availability. No correction of temperature was used to the cross sections data. The thermal burnup and decay data were used in the Origen part of the calculation. The *criticality* calculations were done using the KCODE option of MCNP with 5.000 histories per cycle and 950 active cycles, skipping the first 50 cycles. The temperature of the water in the reactor tank was assumed to be 23°C. This lead in the errors of about 40 pcm (0.04 %) in k<sub>eff</sub> estimates. The *neutron flux* calculations were also performed with the KCODE option of MCNP with 50.000 histories per cycle and 900 active cycles, skipping the first 100 cycles.

The neutron flux distribution for IPR – R1 was simulated in the central thimble and rotary groove air. In the central thimble the neutron flux was calculated in 51 positions located at radius zero and axially varying from z= -25 cm to z= +25 cm, being z=0 the center of the active core. Regarding the rotary groove air were 26 positions, axially, from z=1 cm to z=26 cm and radially located in the center of the groove. Figure 2 shows an axial view of the MCNP geometric model in which one can see such simulated positions as the series of small black traces in the central thimble and in the rotary groove air. The neutron flux spectra were calculated in the central thimble at the coordinates (0, 0, 0) and at the center of the rotary groove in z = 1 cm.



Figure 2. Axial view of the IPR - R1 MCNP model.

#### 3. RESULTS

#### 3.1 Criticality

Table 1 shows the calculated and measured [11] values of excess reactivity, control rods worth (IPR – R1 has 3 rods: Control, Safety and Regulating) and shutdown margin for IPR – R1 at 250 kW core configuration. It can be noticed that the differences between calculations and measurements are bellow the 500 pcm. The standard deviation for  $k_{eff}$  in the Monte Carlo simulations was around 40 pcm. Such value is not negligible to the Regulating rod and this can explain the high relative difference found in this case.

	Calculated ρ (pcm)	<b>Measured</b> ρ (pcm)	Difference (pcm)
Excess reactivity	1558	1822	264
Control rod reactivity worth	2335	2412	77
Safety rod reactivity worth	2221	2212	-9
Regulating rod reactivity worth	274	408	134
Shutdown margin - Control rod out	839	798	41

Table 1 – Measured and Calculated Criticality Results.

# 3.2 Axial And Spectral Distribution Of Neutron Flux In The Central Thimble And Rotary Groove Air.

Neutron flux distributions are plotted in figures 3 and 4. The thermal neutrons are those with energy bellow 0.4 eV, which is the cutoff energy for cadmium, material mostly used to cover gold foil detectors. Flux measurements under similar conditions to the simulations are being planned in order to check the results.



Figure 3. Axial Distribution of Neutron Flux in Central Thimble.



Figure 4. Axial Distribution of Neutron Flux in Rotary Groove Air.

The results of neutron spectrum are presented in table 2 and figures 5 and 6. One can notice the high proportion of neutrons in the energy range between 0.01 eV and 0.1 eV in which can be found the neutrons thermalized at water temperature (around 23 °C, which means around 0.026 eV). The neutron flux below 0.4 eV represents 50% and 60% of the total in central thimble and rotary groove air, respectively.

Energy range (eV)	Neutron Flux in Central Thimble (neutrons/cm2.s)	Neutron Flux in Rotary Groove Air (neutrons/cm2.s)
0 to 0.01	7.24E+11	1.02E+11
0.01 to 0.1	1.06E+13	1.68E+12
0.1 to 0.4	2.45E+12	3.69E+11
0.4 to 1	6.21E+11	7.22E+10
1 to 10	1.29E+12	1.60E+11
$10 \text{ to } 10^2$	1.16E+12	1.55E+11
$10^2$ to $10^3$	1.33E+12	1.67E+11
$10^3$ to $10^4$	1.32E+12	1.82E+11
$10^4$ to $10^5$	1.62E+12	2.20E+11
$10^{5}$ to $10^{6}$	3.03E+12	2.98E+11
10 <sup>6</sup> to 14E10 <sup>6</sup>	3.28E+12	1.98E+11
14E10 <sup>6</sup> to 20E10 <sup>6</sup>	0.00E+00	3.63E+07
Total	2.75E+13	3.60E+12

Table 2 - Spectral Distribution of Neutron Flux in Central Thimble and Rotary Groove Air

APÊNDICE II – Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR – RI Research Reactor Using Monteburns Code. In: International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Argentina, 2002.



Figure 5. Percent Distribution of Neutron Flux Spectrum in Central Thimble - 250 kW.



Figure 6. Percent Distribution of Neutron Flux Spectrum in Rotary Groove Air - 250 kW

#### 3.3 Fuel Characterization

Monteburns system was utilized to characterize the burned fuel of the IPR – R1. Selected chemical elements, yields of nuclear reactions in the fuel, were analyzed. These nuclides had their masses, heatlod, activity, and radiotoxicities calculated. The values presented in table 3 refers to the total of fuel inside the reactor core (63 fuel elements) which followed the irradiation history as described on section 2 of this paper.
Nuclide		Mass (grame)	Activity	Heatload	Inhalation	Ingestion
		(grams)	(C)	(₩)	(m3 of air)	(m3 of water)
Name	MCNP ID				(mo or any	(IIIS OF WARCE)
	number					
Hydrogen	1001.60c	146	0	0	0	0
Zirconium-93	40093.50c	3,6	8,9e-3	1,0e-6	2.2e6	11.1
Technetium-99	43099.60c	1.82	3,1e-2	1,6e-5	4,4e5	103
Rhodium-103	45103.50c	0,96	0	0	0	0
Iodine-127	53127.60c	5.1e-02	0	0	. 0	0
Iodine-129	53129.60c	0,25	4.5e-5	2,1e-8	2,2e6	745
Xenon-131	54131.50c	1,1	ND	ND	ND	ND
Xenon-135	54135.50c	0	0	0	0	0
Cesium-133	55133.60c	2,7	0	0	0	0
Cesium-135	55135.60c	2,3	2,7e-3	8,9e-7	ND	ND
Cesium-137	55137.60c	1,9	1,7e2	0,18	8,2e10	8,2e6
Neodymium-143	60143.50c	2,5	0	0	0	0
Neodymium-145	60145.50c	1,7	0	0	0	0
Promethium-147	61147.50c	4,9e-2	4,5e1	1,6e-2	ND	ND
Samarium-149	62149.50c	9,6e-2	2,3e-14	ND	ND	ND
Samarium-151	62151.50c	0,13	3.4	3,9e-4	ND	ND
Uranium-235	92235.60c	2170	4,7e-3	1,2e-4	2,4e8	156
Uranium-236	92236.60c	13,1	8,5e-4	2,3e-5	4,2e7	28,2
Uranium-238	92238.60c	9010	3,0e-3	7,7e-5	1,0e9	75,6
Neptunium-237	93237.60c	3,0e-2	2,1e-5	6,6e-7	2,1e8	7,14
Neptunium-239	93239.60c	8,6e-14	2,0e-8	4,8e-11	ND	ND
Plutonium-239	94239.60c	6,7	0,4	1,3e-2	6,9e12	8,3e4
Plutonium-240	94240.60c	0,1	2,3e-2	7,2e-4	3,9e11	4,6e3
Plutonium-241	94241.60c	1,9e-3	0,19	5,9e-6	6,4e10	967
Plutonium-242	94242.60c	2,1e-5	8,2e-8	2,4e-9	1, <b>4e</b> 6	1,6e-2
Plutonium-244	94244.60c	4,4e-13	7,7e-18	2,2e-19	ND	ND
Americium-241	95241.60c	1,2e-3	4,1e-3	1,4e-4	2,0e10	1,0e3
Americium-243	95243.60c	1,0e-7	2,0e-8	6,4e-10	1,0e5	5,0e-3
Curium-242	96242.60c	5,3e-10	1,8e-6	6,5e-8	4,4e5	8,8e-2
Curium-243	96243.60c	2,4e-10	1,2e-8	4,6e-10	6,2e4	2,5e-3
Curium-244	96244.60c	6,7e-10	5,4e-8	1,9e-9	1,8e5	7,8e-3
Curium-245	96245.60c	9,8e-13	1,7e-13	5,6e-15	ND	ND
Curium-246	96246.60c	4,3e-15	1,3e-15	4,3e-17	ND	ND
Curium-247	96247.60c	1,3e-15	1,2e-19	3,9e-21	ND	ND
Actinides		11200	1310	1,3	4,6e13	5,1e7

Table 3. Mass, Activity, Heatload and Radiotoxicities of some nuclides in the Fuel.

ND – Data not available in the Origen2.1 and/or MCNP4B libraries.

It was already mentioned that the assumption of constant and continuous burnup followed by a decay time after for each cycle is just an approximation. This assumption as well as the uncertainty on reactor thermal power calibration are the strongest sources of errors of the burned fuel characterization. The magnitude of these errors remains to be estimated. APÊNDICE II – Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR – R1 Research Reactor Using Monteburns Code. In: International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Argentina, 2002.

The simulation has shown that the mass of U235 reaches 2170 grams and just 6.8 grams for all plutonium isotopes, reflecting the very low burnup of the IPR –R1 fuel. Regarding the activity of fission products cesium 137 and promethium 147 show the highest values. The strong activity of the sum of all actinides can not be explained only by the activity of the actinides listed in table 3, but also other actinides like californium, berkelium, etc, have important contribution, not only in the activity, but also over the heatlod and radiotoxicities.

#### 4. CONCLUSIONS

Monteburns system is currently being used for research reactor neutronic analyses. The code system has also been used in simulations of the IPR – R1 TRIGA reactor at CDTN, Belo Horizonte, Brazil. Some experimental data are available for checking the calculation results, but further experiments are necessary in order to validate other calculated parameters.

Criticality calculations are well within the expected accuracy of the calculation methodology and MCNP model. The neutron flux spectrum simulation show the high proportion of neutrons in the energy range between 0.01 eV and 0.1 eV in which can be found the neutrons thermalized at water temperature (around 23 Celsius, which means around 0.026 eV). The neutron flux below 0.4 eV represents 50% and 60% of the total in central thimble and rotary groove air, respectively.

Some chemical elements, yields of nuclear reactions in the fuel, have been analyzed and such nuclides had their masses, heatlod, activity, and radiotoxicities theoretically evaluated. The activities currently being done on the characterization of the burned fuel of IPR – R1 research reactor are part of the efforts to reach an appropriated strategy (transport and interim storage) to deal with spent fuel.

#### REFERENCES

- [1] Ahnert, I., Programa WIMS-TRACA para el calculo de elementos combustibles. Manual de usuario y datos de entrada, Junta de Energia Nuclear; Madrid, 1980.
- [2] Fowler et all. Nuclear Reactor Core Analysis Code: CITATION. Oak Ridge National Laboratory. July 1969.
- [3] Potton D.I. and Trellue H. R., User's Manual, Version 2.0 for Monteburns Version 1.0, LA-UR-99-4999 (September 1999).
- [4] Briesmeister J. F., MCNP A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4B, LA-12625-M, 1997.
- [5] Croff A. G., A User's Manual for the ORIGEN2 Computer Code, ORNL/TM-7175, 1980.
- [6] Ludwig S. ORIGEN2, Version 2.1. Release Notes, August, 1991. Revised May, 1999.
- [7] Dalle H. M. and Jeraj R, Validation of the Monteburns Code for Criticality Calculations of TRIGA Reactors, XIII ENFIR, INAC 2002, Rio de Janeiro, Brazil, 2002.
- [8] Mele I., Ravnik M., Trkov A., TRIGA Mark II Benchmark Experiment, Part I: Steady-State Operation, Nuclear Technology, vol. 105, p 37-52, 1994
- [9] Persic A., Ravnik M., Zagar T., TRIGA Mark II Criticality Benchmark Experiment with Burned Fuel, Nuclear Technology, vol. 132, p 325-337, 2000
- [10] Jeraj R., Zagar T., Ravnik M., Monte Carlo Simulation of the TRIGA Mark II Benchmark Experiment with Burned Fuel, Nuclear Technology, 137 (3), 2002.

APÊNDICE II – Characterization of Burned Fuel of the TRIGA IPR – RI Research Reactor Using Monteburns Code. In: International Meeting on Reduced Enrichment for Research and Test Reactors, Argentina, 2002.

- [11] Souza, R. M. G. P., Resende, M. F. R., Mesquita, A. Z., Valente, E. S., Wakabayashi, T., Resultados dos Testes Iniciais para o Aumento de Potência do Reator TRIGA IPR - R1, NI-IT4-01/01, CDTN, Belo Horizonte, 2001.
- [12] Jeraj R. and Ravnik M., TRIGA Mark II reactor : U(20) zirconium hydride fuel rods in water with graphite reflector (IEU-COMP-003), in International Handbook of Evaluated Criticality Safety Benchmark Experiments, (NEA/NSC/DOC, (95)03). Paris: Nuclear Energy Agency (1999).

# SHIELDING AND CRITICALITY SAFETY ANALYSES OF A LATIN AMERICAN CASK FOR TRANSPORTATION AND INTERIM STORAGE OF SPENT FUEL FROM RESEARCH REACTORS

Hugo Moura Dalle<sup>1, 2</sup>, Elias B. Tambourgi<sup>2</sup>

Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN/CNEN Caixa Postal 941, CEP: 30123-970 – Cidade Universitária Pampulha, Belo Horizonte, Brazil

<sup>F</sup>Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP Cidade Universitária "Zeferino Vaz", Caixa Postal 6066 - CEP 13081-970 – Campinas, Brazil

### ABSTRACT

Shielding and criticality safety calculations carried out for the Latin American interim storage and transportation cask are presented. Such dual purpose cask is being designed to the spent fuel elements of research reactors in the region. The Monte Carlo transport code MCNP4B was utilized for the criticality safety analysis part and SCALE4.4A for shielding. The analyses considered two types of fuel assemblies utilized in the region and the results show that both types can be loaded in the designed cask baskets in compliance with the safety criteria.

## **1. INTRODUCTION**

The IAEA Technical Cooperation Project RLA/4/018 "Management of Spent Fuel from Research Reactors" started in 2001. It constitutes a joint effort of Latin American nuclear institutions from Argentina, Brazil, Chile, Mexico, and Peru to accomplish the following objectives: "to define the basic conditions for a regional strategy for managing spent fuel which will provide solutions that are in the economic and technological realities of the countries involved, and in particular, to determine what is needed for the temporary wet and dry storage of spent fuel from the research reactors in the countries of the Latin American region".

Such work gets considerable importance since the USA spent fuel take-back program will be end in May, 2006. After that the Latin American research reactors operators will need to identify and assess all possible options to deal with their spent fuel by themselves.

Part of the project consists in to design a cask for interim storage and transportation of the spent fuel produced by these research reactors. In Latin America there are two main types of research reactors under operation: TRIGA and MTR reactors. Such concern is being taken into account in the cask design that must be suitable for the different fuel elements used in these reactors.

The shielding analysis of the cask is being carried out with SCALE4.4A [1]. The SCALE package is a codes system for licensing purposes well known and frequently used for criticality safety, source terms determination, shielding and Heatload analyses of similar casks manufactured by different vendors around the world. The criticality safety analysis of the cask also is being carried out with SCALE4.4A. However, this paper will present only criticality simulations performed utilizing the Monte Carlo transport code MCNP4B [2].

## 2. DESIGN CRITERIA

As recommended by IAEA [3, 4] the shielding and criticality safety criteria to the cask can be summarized as follows:

The maximum dose values at the highest intensity point must be, for the sum of the gamma and neutron dose rates, lower than

10000  $\mu$ Sv/h (1 Rem/h) - Local dose rate on the surface of the cask which can be easily touched during transport under exclusive use.

Concerning criticality safety the calculated neutron multiplication factor, using Monte Carlo transport methods must be, for normal conditions as well as under accident conditions, lower than 0.95. Such condition can be mathematically expressed as,

$$(k_{eff} + 2\sigma) < 0.95$$
.

This condition must be guaranteed under an optimally moderated situation that will be assumed here as corresponding to the cask totally water flooded.

### **3. FUEL ELEMENTS DATA**

Several fuel element types have been used in the Latin American research reactors, however, only two types were analyzed in this paper. The first one refers to the MTR fuel elements, box type. Actually, these fuel elements are the standard type manufactured by CNEA (Argentinean Atomic Energy Commission) for its RA-3 research reactor [5-7]. The other fuel element type considered is the TRIGA type, indeed the fuel elements used in the Brazilian TRIGA IPR-R1 reactor [8, 9]. The main characteristics of these two types of fuel elements are summarized in tables I and II and in figures 1 and 2. The RA-3 standard fuel elements have 19 fuel plates fueled with  $U_3O_8$ -Al in an Aluminum cladding assembled in an Aluminum structure and the IPR-R1 (TRIGA) fuel elements are cylindrical bars fueled with a metallic Uranium and Zirconium-Hydride homogenous alloy also in Aluminum cladding.

	MTR Fuel Elements (RA-3)	TRIGA Fuel Elements (IPR-R1)
Mass of U3O8 (g)	1743.2	
Mass of HZr (g)		2250
Mass of H (g)	400-000 400 mm	24.5
Mass of Uranium (g)	1475.7	188
Mass of U235 (g)	290.7	37.2
Mass of Aluminum (g)	626.1	
Enrichment (% mass)	19.75	19.81
Density (g/cm3)	4.8	6,2

	lable	I. 1	Compositions	of the	Fuel.
--	-------	------	--------------	--------	-------

Component	Dimension (cm	) Material
MTR Fuel Plates		
Active Zone		
Thickness	0.07	U308-Al (p=4.8 g/cm3)
Width	6.0	U308-A1
Height	61.5	U308-Al
Cladding thickness	0.04	Aluminum ( $\rho=2.7$ g/cm3)
Plates Height	65.5	Aluminum
Others	as figure 1	
TRIGA Fuel Elements		
Active Zone		
Outer diameter	3.73	
Fuel Height	35.56	
Fuel diameter	3.56	U-ZrH ( $\rho$ =6.2 g/cm3)
Cladding thickness	0.076	Alumínio ( $\rho=2.7 \text{ g/cm}3$ )
Lenght	72.24	
Axial reflectors	10.16	Graphite ( $\rho=1.7$ g/cm3)
Others	as figure 2	

Table II. Dimensions and Materials Data



Figure 1. MTR fuel element



Figure 2. TRIGA fuel element

## 4. CASK GEOMETRY AND MATERIALS MODELING

The geometry and materials modeling of the cask follows the characteristics showed in the figure 3. All dimensions in the figure are in millimeters and no component tolerances are taken into account. It means that these dimensions shall be the minimum accepted for manufacturing process. The cask has an inner and an outer shell (liner) made with stainless steel ANSI 304. A lead shield in between the shells completes the model.

Due to the different types of fuel elements used in the region many baskets shall be designed. Currently, the calculations were performed considering only two types of basket, both made with SS304. One for MTR elements, which hosts 21 fuel elements (figure 3) and another basket for TRIGA with 78 locations (see figure 4).

APÊNDICE III – Shielding and Criticality Safety Analyses of a Latin American Cask for Transportation and Interim Storage of Spent Fuel From Research Reactors. In: International Conference on Research Reactor Utilization, Safety, Decommissioning, Fuel and Waste Management, Chile, 2003.



Figure 3. Schematic drawing of the cask with the 21-MTR basket



Figure 4. Schematic drawing of the TRIGA-basket

## 5. RADIATION SOURCE TERMS DETERMINATION

Two types of radiation sources were determined. The first one refers to the MTR fuel elements. The another is to the TRIGA type. The ORIGEN-ARP module of SCALE package was used to determine the gamma and neutron sources using libraries produced using the SAS2 module.

The gamma and neutron sources were estimated considering a burnup of 50% (U235 depleted) for MTR and 25% for TRIGA fuel. Furthermore, a 5 (five) years decay time (cooling time) was adopted in the model.

The gamma and neutron spectra as well as the source strengths can be seen in table III. Those values are per fuel element, it means that in order to get the total source strength inside the cask the values in the table III must be multiplied by the number of fuel elements. The energy group structure for neutrons and gamma are as the 27N-18Couple SCALE library.

Gamma with low energy, which are strongly shielded, are the majority and the high energy gamma are just a few. It is a favorable condition from shielding point of view. The same is observed for neutrons. The gamma and neutron source intensity is assumed flattened over the entire fuel element active length (that is a short length). Due to the weak neutron source intensity, after five years cooling time, no neutron-induced gamma radiation is assumed. Neutron source considers the contribution of spontaneous fission neutrons and neutrons from the  $\alpha$ -n reactions in the oxygen of the fuel.

Energy (MeV)	Gamma (photons/s/element)		Energy (MeV)	Neutrons (neutrons/s/element)	
	MTR	TRIGA		MTR	TRIGA
10.0 to 8.0	2.8249E+00	1.0	20.0 to 6.43	8.018E+01	1.342E+00
8.0 to 6.5	1.3357E+01	1.0	6.43 to 3.0	1.263E+03	2.563E+01
6.5 to 5.0	6.8483E+01	1.3068E+00	3.0 to 1.85	2.004E+03	4.627E+01
5.0 to 4.0	1.7173E+02	3.2915E+00	1.85 to 1.40	8.357E+02	1.735E+01
4.0 to 3.0	2.9648E+07	6.1579E+05	1.40 to 0.90	9.196E+02	1.725E+01
3.0 to 2.5	2.6175E+08	5.4300E+06	0.90 to 0.40	8.828E+02	1.530E+01
2.5 to 2.0	3.3792E+10	6.9080E+08	0.40 to 0.10	1.711E+02	2.949E+00
2.0 to 1.66	5.6799E+09	1.5103E+08			
1.66 to 1.33	7.3329E+10	1.6087E+09			
1.33 to 1.0	1.8011E+11	5.0044E+09			
1.0 to 0.8	7.4752E+11	1.4928E+10			
0.8 to 0.6	1.2597E+13	6.8141E+11			
0.6 to 0.4	2.0304E+12	4.7645E+10			
0.4 to 0.3	5.4545E+11	2.4711E+10			
0.3 to 0.2	7.3889E+11	3.3934E+10			
0.2 to 0.1	2.6894E+12	1,1497E+11			
0.1 to 0.05	3.3567E+12	1.5790E+11			
0.05 to 0.01	1.1223E+13	5.3731E+11			
Total	3.4221E+13	1.6203E+12		6.157E+03	1.261E+02

Table III. Calculated neutron and gamma source for MTR and TRIGA fuel

## 6. CALCULATION METHOD

### 6.1. Shielding

The shielding calculations were performed using the SAS4 module of SCALE4.4A. The Shielding Analysis Sequence No. 4 (SAS4) performs a three-dimensional (3-D) Monte Carlo shielding analysis of a nuclear fuel transport or storage cask using an automated biasing procedure. In a Monte Carlo shielding analysis of a deep-penetration problem such as a spent fuel cask, variance reduction techniques must be used to calculate reasonably good results at an affordable cost. Generation of biasing parameters and application of the parameters to solve a particular problem are no trivial tasks. The entire procedure for cross-section preparation, adjoint flux calculation, automatic generation of Monte Carlo biasing parameters, and a Monte Carlo calculation has been implemented in this control module to provide calculated radiation dose levels exterior to the cask at a reasonable computational cost. The response function (dose factor) utilized in the calculation is the Neutron and Gamma Ray Flux-to-Dose Rate Factors ANSI/ANS-6.1.1, 1977.

Regarding the fuel region simulation the homogeneous model IGO=0 was adopted. The cask cavity has 30 cm radius and 94 cm height. However, the active zones of fuel elements have 61.5 cm height and 38.1 cm height, respectively, for MTR and TRIGA fuel. Therefore, the model assumes conservatively two void zones in the bottom and top of the cask cavity due to the negligible activation of the Aluminum end fittings of the fuel elements. No radial void is assumed.

In the model, the basket is represented as a homogeneous cylindrical source zone with 30 cm radius and 61.5 cm height (for MTR) or 38.1 cm height (for TRIGA) located at the axial mid-plane. The source material fulfilling the source zone is modeled having one third of the fuel density and the concentration of heavy metal (Uranium) in the fuel is reduced by the same factor in order to conservatively to reduce the self-shielding of the source.

## 6.2. Criticality

The main concern of the cask criticality safety analysis is to guarantee that the nuclear fuel inside the cask will be maintained safely sub-critical, under both, normal conditions as well as under accident conditions. The cask leak-tight containment shall be able to prevent water penetration into the cask cavity. This is applicable for normal conditions and also after the cask suffers the type B tests.

The criticality safety calculations were performed using the MCNP4B code. It is a multipurpose Monte Carlo program used for stochastic simulation of particles transport (neutrons, photons and electrons). MCNP is a 3D code and has graphical resources very useful for modeling visualization.

In the adopted model every criticality calculation assumes that the fuel elements are fresh, which means that no burnup is considered. This is a very conservative hypothesis as such situation definitively is not the standard for a spent fuel elements cask. The masses of fissile material in the fresh fuel elements were informed by the reactors operators. No poisoning effect is considered and in particular for TRIGA fuel the Samarium burnable poison discs are not taken into account.

All calculations were carried out using the point-wise cross-sections library based on ENDF/B-VI data. The calculations were performed considering room temperature, equal to 293 Kelvin. No temperature corrections were applied to the MCNP cross-section data. A very accurate geometrical model for each fuel element of the basket is used. All simulations used 5000 neutron histories and 750 cycles, skipping the 50 first cycles in order to avoid fluctuations coming from statistical uncertainties.

Regarding the neutrons moderation three situations were analyzed. The first is the normal operational condition in which the cask is fully dry and just air surrounds the fuel elements. The two others consist in accident conditions in which the cask is totally water flooded, being one situation corresponding to only the cavity flooded and in the another situation the cavity is flooded and also the whole cask is surrounded by a 30 cm thick layer of water. Furthermore, only to the MTR21 basket, it was simulated a case in which the dimensions of the internal basket cells were reduced from 10.0 cm to 8.74 cm in order to simulate a situation in which the fuel elements are as close to each other as possible.

# 7. RESULTS

## 7.1. Shielding

The shielding calculation results are summarized in tables IV and V. They present the dose values at the highest intensity point at cask outermost side wall and bottom as well as at 1 m and 2 m away from the cask surfaces for both fuel element types. Results shown in table IV were obtained using SAS4 and refer to MTR21 basket, while table V refers to TRIGA basket. The neutron dose contribution to the total dose rates are not significant. The main contribution comes from gamma radiation, as expected, since the analysis was carried out considering a five years cooling time. The highest dose rates occur at the top (or bottom) surface of the cask. In any case such values are bellow the limit for shielding criterion.

		Side Dose Rates (µSv/h)		
		Distance (m)	Distance (m)	Distance (m)
Case	Source	0	1	2
N rad 21	Neutron	4.33	0.39	0.13
G rad 21	Gamma	229.13	30.29	10.37
	Total	233.5	30.7	10.5
	ARAR WANTED AND AND AND AND AND AND AND AND AND AN	Тор	Bottom Dose Rates (µ	ıSv/h)
		Distance (m)	Distance (m)	Distance (m)
Case	Source	0	1	2
N bot 21	Neutron	4.39	0.31	0.09
<b>G</b> _bot_21	Gamma	1515	240.5	72.35
	Total	1519.4	240.8	72.4

### Table IV. SAS4 dose rates for basket with 21 MTR fuel elements

Table V. SAS4 dose rates for basket with 78 TRIGA fuel elements

	Side Dose Rates (µSv/h)			
		Distance (m)	Distance (m)	Distance (m)
Case	Source	0	1	2
N rad 78	Neutron	0.08	0.006	0.002
G rad 78	Gamma	22.3	2.17	0.8
	Total	22.4	2.2	0.8
		Тор	/Bottom Dose Rates (µ	ıSv∕h)
		Distance (m)	Distance (m)	Distance (m)
Case	Source	0	1	2
N bot 78	Neutron	0.08	0.005	0.002
G bot 78	Gamma	111.2	21.1	7.2
	Total	111.3	21.1	7.2

## 7.2. Criticality

The criticality calculation results are summarized in tables VI and VII. They present the  $k_{eff} \pm 2\sigma$  to the cask loaded with the MTR basket and with the TRIGA basket. In both cases the results refer to the aforementioned moderation conditions.

The highest  $k_{eff}$  is to the cask loaded with MTR21 basket, inside and outside flooded and with reduced dimensions of the internal basket cells. One can note that under normal conditions, in which the cask is dry, the  $k_{eff}$  of the MTR basket is too small while for TRIGA basket it is almost a half of the value to the cask flooded. Such fact represents well the importance of the Zirconium-hydride alloy as moderator in the TRIGA fuel.

Case	$(k_{eff} \pm 2\sigma)$	Remarks
CA21AR	$0.05073 \pm 0.00008$	21 MTR elements and Air inside the cask
CA21AG	$0.86348 \pm 0.00084$	21 MTR elements and water inside the cask
CA21AGF	$0.86412 \pm 0.00084$	21 MTR elements and water inside and outside the cask
CA21AX	$0.89890 \pm 0.00082$	21 MTR elements, water inside and outside the cask and
		8.74 cm side length of the internal basket cells

Table VI. Criticality results for MTR Fuel

Table VII. Criticality results for TRIGA Fuel

Case	$(k_{eff} \pm 2\sigma)$	Remarks
CA78AR	$0.41213 \pm 0.00066$	78 TRIGA elements and Air inside the cask
CA78AG	$0.87049 \pm 0.00072$	78 TRIGA elements and water inside the cask
CA78AGF	$0.87165 \pm 0.00070$	78 TRIGA elements and water inside and outside the cask

In any case, concerning the criticality safety criterion, it is guaranteed that for both fuel element types and baskets the cask can be loaded and unloaded safely. Thus, the fuel elements may also be stored or transported safely sub-critical even in the hypothetical situation of the cask to be water flooded.

As a design requirement the cask and baskets shall keep their integrity after the type B tests. Nevertheless, there may be local deformations of the cask inner liner and basket. This situation must be analyzed, concerning both criticality safety and shielding, after the type B tests. Moreover, further calculations are necessary in order to analyze the other fuel element types currently used in other Latin American research reactors.

## 8. CONCLUSIONS

The SCALE4.4A package was used for shielding calculations of a Latin American dual purpose cask and MCNP4B for criticality safety. The analyses just considered two types of fuel elements (one TRIGA type and another MTR type) among several utilized for the Latin American research reactors. Moreover, two types of baskets were considered for loading of these fuel elements, one for 21 MTR elements and another for 78 TRIGA elements. In any case the results show compliance with the shielding and criticality safety criteria.

The simulations show that the highest dose rates occur at the top (or bottom) surface of the cask. The dose rates for TRIGA basket are well bellow the values of the MTR basket. In any case such values are bellow the limit. Concerning the criticality safety the sub-criticality is also guaranteed for the cask loaded with both types of baskets and fuel elements. Thus, these two types of fuel elements can be safely stored or transported by the cask under the point of view of shielding and criticality safety.

## ACKNOWLEDGEMENTS

The authors acknowledge the support of the International Atomic Energy Agency (IAEA) through the project RLA/4/018 which makes possible the accomplishments here described. Such support has strongly contributed to the development of the Latin American strategy for management of the research reactors spent fuel.

# REFERENCES

[1] Oak Ridge National Laboratory. SCALE4.4A Eletronic Manual. ORNL/RSICC, 2000.

[2] Briesmeister J. F., MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 4B, LA-12625-M, 1997.

[3] Safety Series N° 6. Regulations for the Safe Transport of Radioactive Materials. International Atomic Energy Agency Vienna, 1985.

[4] Safety Series N° 37. Advisory Material for the IAEA Regulations for the Safe Transport of Radioactive Materials. International Atomic Energy Agency Vienna, 1985.

[5] Medina E. G., Nassini H. E., Informe de Diseno en Condiciones Normales de Operacion de los Elementos Combustibles de Bajo Enriquecimiento (ECBE) Normal y de Control Destinados al RA-3. CNEA, UPESN, IT-IEC 02/90, Argentina.

[6] Perez E. E., Descripción del Prototipo ECBE de 19 Placas Combustibles para Irradiacion en el RA-3. CNEA, Departamento Combustibles Nucleares, Argentina.

[7] Personal communication of Mr. Jorge Quintana from Centro Atômico Ezeiza, Argentina, at IPEN/CNEN, May of 2002, São Paulo, Brazil.

[8] Dalle H. M., Cálculo Neutrônico do Reator Triga IPR – R1 Utilizando WIMSD4 e Citation. Dissertação de Mestrado, UFMG, 1999, Belo Horizonte, Brazil.

[9] Dalle, H. M., Pereira, C., Souza, R. G. P. Neutronic calculation to the TRIGA IPR-R1 Reactor using the WIMSD4 and CITATION codes. Annals of Nuclear Energy, Vol 29, Aug 2002 pp. 901-912.