

BR8306777

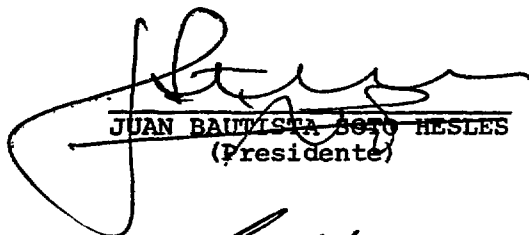
INIS-mf.-7846

ESTUDO METODOLÓGICO PARA CÁLCULOS DE SENSIBILIDADE
DE PARÂMETROS INTEGRAIS DE REATORES RÁPIDOS

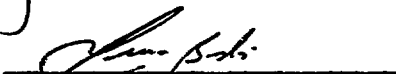
Carlos Alberto Curi Renke

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.)

Aprovada por:



JUAN BAPTISTA BETO HESLES
(Presidente)



WILMA DOS SANTOS BASTOS



ZIELI DUTRA THOMÉ FILHO

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
JUNHO DE 1981

RENKE, CARLOS ALBERTO CURI

Estudo Metodológico para Cálculos de Sensibilidade de Parâmetros Integrais de Reatores Rápidos (Rio de Janeiro) 1981. VIII, 181 p. 29,7 cm (COPPE-UFRJ, M.Sc., Engenharia Nuclear, 1981)

Tese - Univ. Fed. Rio de Janeiro.

1. Seções de choque. 2. Análises de sensibilidade. 3. Ajuste. 4. Reatores Rápidos.

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

À minha mãe,
esposa e filhos.

AGRADECIMENTOS

Nesta oportunidade gostaria de agradecer a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho, em particular:

Ao Dr. Juan Bautista Soto Hesles, pela sugestão do tema e orientação recebida;

Ao Dr. Luiz Osório de Brito Aghina, pelas valiosas sugestões e apoio recebido;

À Dra. Wilma dos Santos Bastos, pelo seu atencioso apoio;

Ao Dr. Zield Dutra Thomé Filho, pela participação na banca examinadora;

Ao IEN - Instituto de Engenharia Nuclear, na pessoa do Dr. Luiz Osório de Brito Aghina, por ter proporcionado as condições para a realização deste trabalho;

Aos componentes da Divisão de Matemática Aplicada e Computação do IEN, pela colaboração com o uso do computador;

Aos colegas do IEN, em particular aos pertencentes às Divisões de Neutrônica e Mecânica Estrutural, pelo incentivo e amizade;

À Equipe do Programa de Engenharia Nuclear da COPPE/UFRJ, pela colaboração recebida;

Finalmente, à Sra. Iraneide de Castro Oliveira, pelos serviços de datilografia.

RESUMO

~~Neste trabalho é estudada~~ ^{Estuda-se} a metodologia para cálculos de sensibilidade de parâmetros integrais de reatores rápidos para o ajuste de seções de choque multigrupo.

Descreve-se os diversos métodos e teorias existentes, dando-se uma ênfase especial à teoria da perturbação variacional, integrante do código de sensibilidade VARI-1D utilizado neste trabalho.

São definidos dois sistemas de cálculo e estruturado um conjunto de procedimentos e critérios, reunindo-se as condições necessárias para a determinação dos coeficientes de sensibilidade, sendo estes computados pelo método direto e pela teoria da perturbação variacional.

Uma razoável quantidade de coeficientes de sensibilidade são computados e analisados para três montagens críticas rápidas, abrangendo uma faixa de especial interesse do espectro. Estes coeficientes foram determinados para diversos parâmetros integrais, para as seções de choque (de captura e fissão) do U-238 e Pu-239, cobrindo-se toda a faixa de energia até 14,5 MeV. Os dados nucleares utilizados foram provenientes do sistema de cálculo CARNAVAL II, do Instituto de Engenharia Nuclear.

É feita uma otimização para cálculos de sensibilidade, dentro de uma sequência encadeada de procedimentos, obtendo-se, como estágio final, sensibilidades em macrogrupos de energia. (autor).

ABSTRACT

~~In this work~~ A study of the methodology for sensitivity calculations of integral parameters of fast reactors for the adjustment of multigroup cross sections is presented.

A description of several existent methods and theories is given, with special emphasis being regarded to variational perturbation theory, integrant of the sensitivity code VARI-1D used in this work,

Two calculational systems are defined and a set of procedures and criteria is structured gathering the necessary conditions for the determination of the sensitivity coefficients. These coefficients are then computed by both the direct method and the variational perturbation theory.

A reasonable number of sensitivity coefficients are computed and analyzed for three fast critical assemblies, covering a range of special interest of the spectrum. These coefficients are determined for several integral parameters, for the capture and fission cross sections of the U-238 and Pu-239, covering all the energy range up to 14.5 MeV. The nuclear data used were obtained from the CARNAVAL II calculational system of the Instituto de Engenharia Nuclear,

An optimization for sensitivity computations in a chained sequence of procedures is made, yielding the sensitivities in the energy macrogroups as the final stage. (author).

SUMÁRIO

I - INTRODUÇÃO	01
I.1 - Natureza do Problema	01
I.2 - Objetivo do Trabalho	07
II - REVISÃO DAS TEORIAS ENVOLVIDAS EM ANÁLISE DE SENSIBILIDADE..	11
II.1 - Introdução	11
II.2 - Teoria da Perturbação Clássica	14
II.3 - Teoria da Perturbação Variacional	18
II.3.1 - Razões de Funcionais Lineares do Fluxo Real	18
II.3.2 - Razões de Funcionais Bilineares do Fluxo Real e de Adjunto	23
II.3.3 - Efeito em Reatividade em Sistemas Altera- dos	30
II.4 - Teoria da Perturbação Generalizada	34
II.4.1 - Razões de Funcionais Lineares do Fluxo Real	35
II.4.2 - Razões de Funcionais Bilineares do Fluxo Real e Adjunto	37
II.4.3 - Efeito em Reatividade em Sistemas Altera- dos	39
II.5 - Comparação entre a Teoria da Perturbação Variacio- nal e a Teoria da Perturbação Generalizada	41
II.5.1 - Razões de Taxas de Reações em Sistemas Alterados	41
II.5.2 - Efeito em Reatividade	43

II.5.3 - Efeito em Reatividade em Sistemas Al-	
rados	44
III - MÉTODOS DE CÁLCULO E PROCEDIMENTOS	48
III.1 - Biblioteca de Dados Utilizada	48
III.1.1 - Código HETAIRE	50
III.2 - Descrição das Montagens Experimentais	51
III.3 - Parâmetros Utilizados para Análise de Dados e	
Estudos de Sensibilidade	56
III.4 - Sistemas de Cálculo	59
III.4.1 - Cálculos Utilizando o Método Direto ...	61
III.4.2 - Cálculos Utilizando a Teoria Varia-	
cional	62
III.5 - Critério Adotado para a Obtenção dos Coeficien-	
tes de Sensibilidade	66
IV - PARALELO ENTRE OS SISTEMAS DE CÁLCULO	70
IV.1 - Sensibilidades dos Parâmetros Integrais	70
IV.1.1 - Sensibilidades das Razões de Taxas de	
Reações	70
IV.1.2 - Sensibilidades do k_{eff}	74
IV.1.3 - Sensibilidades dos Efeitos em Reativi-	
dade	74
IV.2 - Sensibilidades do Espectro	77
V - ESTUDO DA REDUÇÃO DO NÚMERO DE GRUPOS DE ENERGIA	89
V.1 - Considerações Iniciais	89
V.2 - Sensibilidades das Razões de Taxas de Reações, do	
k_{eff} e do Efeito em Reatividade do U-235, por Grupo	
de Energia	90

V.3 - Estruturação e Análise dos Reagrupamentos	91
VI - RESULTADOS E CONCLUSÕES	113
VI.1 - Coeficientes de Sensibilidade em Macrogrupos de Energia	113
VI.2 - Comparação entre a Estrutura de Grupos SENSI e a Estrutura de Macrogrupos, com o Critério de Sensi- bilidade Integral	128
VI.3 - Utilização da Estrutura de Macrogrupos em um Pro- cesso de Ajuste	131
VI.4 - Conclusões	133
APÊNDICES	
A - Conceituação da Função Importância Baseada na Noção de Ciclo Neutrônico	137
B - Cálculos Realizados pelo Código HETAIRE	147
C - Valores Experimentais e Calculados dos Parâmetros Inte- grais Utilizados	151
D - Programas HETAVERI8 e FORMTX	155
E - Critério para Recuperação dos 25 Grupos Originais	163
F - Espectros das Montagens Críticas Consideradas	167
BIBLIOGRAFIA	174

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

I.1 - Natureza do Problema

Os métodos de cálculo utilizados para a determinação dos parâmetros de projeto dos reatores nucleares tem atingido nos últimos anos um desenvolvimento tal que os erros cometidos devido a imperfeições na teoria e aproximações nos cálculos tornaram-se menores que os erros introduzidos por incertezas nos dados nucleares.

Com o advento dos reatores rápidos, o problema atinente às incertezas nestes dados passou a ter proporções e implicações bem maiores, já que a faixa de energia de maior interesse, que envolve as seções de choque microscópicas dos diferentes isótopos, neste caso, se encontra entre 1 KeV e 10 MeV. Assim sendo, para o projeto e avaliação neutrônica destes reatores, há necessidade de um conhecimento detalhado das constantes nucleares microscópicas em função da energia o que, infelizmente, ainda não ocorre.

A despeito de consideráveis avanços que tem sido recentemente feito nas medidas de tais dados, para certos isótopos a discrepância entre medidas experimentais de diferentes autores chega a ser maior que a incerteza individual de cada medida.

Em vista das discrepâncias experimentais em relação aos dados nucleares, a sistemática adotada tem sido a formação de grupos de físicos avaliadores.

A função destes grupos é compilar os dados nucleares fornecidos pelos diversos laboratórios experimentais, analisar e julgar a confiabilidade destes dados e, finalmente, agrupá-los formando uma biblioteca de dados avaliados. Esta biblioteca pontual constitui-se assim o melhor jogo de dados nucleares disponíveis, a partir da qual pode ser definida uma biblioteca multigrupo, que então é integrada a um formulário, entendendo-se como tal o conjunto de métodos de cálculo e dados de base utilizados para o cálculo de reatores.

Os dados de base constituintes desta biblioteca multigrupo possuem incertezas inerentes, oriundas dos dados nucleares pontuais, selecionados na fase de avaliação. É ponto fundamental que estas incertezas sejam devidamente catalogadas para os principais isótopos, em suas várias reações e grupos de energia, constituindo-se assim um jogo de incertezas do formulário de referência.

Um papel fundamental desempenham as montagens críticas no melhoramento das precisões dos dados nucleares, tendo-se em vista a possibilidade de medição dos diversos parâmetros integrais, com uma precisão bastante razoável. Estas montagens tem sido desenvolvidas com arranjos geométricos relativamente simples, apresentando diferentes composições isotópicas e distribuições espectrais de nêutrons, e tem permitido testar a qualidade dos métodos de cálculo bem como o isolamento de incertezas das

bibliotecas de dados.

Um extenso programa de trabalhos vem sendo desenvolvido tanto nos EUA como nos países europeus, dentre os quais a França, visando o refinamento gradativo dos dados nucleares, a partir das indicações que podem advir destes valores medidos. Dois procedimentos vem sendo adotados pelos laboratórios nucleares.

No primeiro procedimento, as discrepâncias entre os valores dos parâmetros integrais calculados e obtidos experimentalmente são utilizadas como indicadores para novas avaliações. Este critério, de caráter amplo, vem mobilizando um número razoável de pesquisadores, sendo portanto dispendioso e lento, porém garantirá ao fim de vários ciclos, uma biblioteca altamente refinada e precisa, e portanto com condições de utilização ampla para qualquer tipo de cálculo neutrônico.

O segundo procedimento consiste no ajuste estatístico da biblioteca multigrupo,^(*) visando tornar mínima a diferença entre os valores dos parâmetros integrais medidos e calculados. Este critério, conforme esclarecido na referência (1), devido ao seu caráter objetivo, é mais eficiente e rápido que o primeiro, porém conduzirá a uma biblioteca multigrupo, de aplicação bastante limitada, com utilização satisfatória apenas para o cálculo de reatores dentro de uma faixa restrita do es-

(*) - Na referência (1) encontra-se uma detalhada análise dos vários métodos de ajuste empregados.

pectro e com características similares daqueles cujas informações experimentais foram utilizadas no processo de ajuste.

A este ponto cabe ressaltar que dentro deste extenso programa de trabalhos, as análises de sensibilidade mostram-se indispensáveis, podendo-se distinguir duas etapas:

1. Conhecendo-se o jogo de incertezas do formulário de referência, é indispensável que, para um modelo geometricamente simples de um reator rápido tomado como referência, sejam executados cálculos de sensibilidade para estimar-se as repercussões que estas incertezas acarretam sobre os principais parâmetros característicos do reator. Esta análise revelará quais imprecisões são julgadas preponderantes, indicando ainda os limites máximos a serem tolerados, de tal sorte a se atender as demandas de precisão do projeto.

A partir deste estudo se tem condições de estruturar um conjunto de prioridades, as quais podem ser utilizadas como indicadores para novas avaliações, complementando aquelas já citadas acima.

Um trabalho deste tipo foi realizado por Barré (França)^(2,3), tendo sido utilizado um jogo de constantes nucleares com a estrutura de grupos de energia do jogo ABBN⁽⁴⁾. Por se tratar de um jogo de dados considerado como precursor daquele integrante do sistema de cálculo CARNAVAL II⁽⁵⁾, este trabalho tem merecido a nossa atenção. Nesta análise foram utilizados sete

isótopos: U-238, Pu-239, Pu-240, Fe, Ni, Na e O.

Os valores das incertezas globais estimadas, obtidos para alguns parâmetros importantes, são mostrados na tabela (I.1) para os isótopos cujas influências se mostraram mais acentuadas. São mostrados também os níveis de precisão requeridos. A insuficiente acuracidade dos dados nucleares transparece do exame desta tabela.

Mais especificamente, tem sido observado que as mais importantes incertezas estão nas seções de choque de captura e fissão do U-238 e Pu-239^(2,6).

2. No procedimento de ajuste estatístico da biblioteca multigrupo, faz-se sentir a necessidade das análises de sensibilidade, com a finalidade de estimar os coeficientes de sensibilidade (α), que constituem-se parte integrante de qualquer método de ajuste.

De trabalhos desenvolvidos por Barré^(7,8), pode-se concluir que são necessárias aproximadamente 59500 estimativas de (α) para desenvolver-se um programa modesto de ajustes, envolvendo 4 isótopos e 3 tipos de reações.

Tendo em vista a quantidade necessária destes coeficientes, bem como a qualidade envolvida em suas estimativas, de forma a não comprometer os resultados do ajuste, é aparente a importância de utilização de técnicas de cálculo precisas, mas economicamente operacionais.

TABELA I.1 - COMPARAÇÃO ENTRE AS INCERTEZAS (*) EM ALGUNS PARÂMETROS IMPORTANTES DOS REATORES RÁPIDOS DEVIDO ÀS INCERTEZAS NOS DADOS NUCLEARES E OS NÍVEIS DE PRECISÃO REQUERIDOS

PARÂMETROS	INCERTEZA GLOBAL ESTIMADA (%)					PRECISÃO REQUERIDA (%)
	U-238	Pu-239	Pu-240	Ferro	Oxigênio	
k_{eff}	± 4,6	± 4,0	± 0,9	± 2,0	-	± 0,6
razão de geração interna	± 12,0	± 13,0	-	± 3,0	± 2,0	± 1,0
tempo de vida dos nêutrons prontos	± 17,0	± 8,0	-	± 4,0	± 4,0	± 5,0
efeito de vazios do sódio (perda de 1 cm ³ ao centro) - efeito de degradação	± 50,0	± 40,0	± 10,0	± 15,0	-	± 5,0
razão do fluxo integral abaixo de 1.4 MeV pelo fluxo total	± 10,0	± 2,0	-	± 7,0	± 1,0	-

(*) - Levantadas do Modelo Correspondente à Zona Central do Reator PHENIX 250I.

I.2 - Objetivo do Trabalho

O objetivo deste trabalho é o estudo da metodologia para cálculos de sensibilidade de parâmetros integrais de reatores rápidos para o ajuste de seções de choque multigrupo. Desta forma, as análises de sensibilidade desenvolvidas neste trabalho estão voltadas à segunda etapa referida na seção I.1.

Tendo em vista o desequilíbrio existente entre o limitado número de valores de parâmetros integrais medidos e conhecidos e o grande número de seções de choque multigrupo a serem ajustadas estatisticamente, surge a necessidade de obtenção de uma solução conciliadora.

O grande dispêndio computacional necessário ao cálculo dos coeficientes de sensibilidade na estrutura de grupos original do sistema CARNAVAL II⁽⁵⁾ (25 grupos), bem como a impraticabilidade de utilização do método direto nestes cálculos são questões cuja solução mereceram também a nossa atenção.

O trabalho se desenvolveu através das etapas abaixo descritas.

No capítulo II é feita uma exposição detalhada dos diversos métodos e teorias utilizadas para análises de sensibilidade, sendo apresentadas as teorias da perturbação clássica, variacional e generalizada, salientando-se ainda, através de uma análise comparativa, o grau de precisão superior que as estimativas obtidas com a teoria da perturbação variacional possuem em relação às calculadas com a teoria da perturbação gene-

realizada. Tal fato constituiu-se uma forte razão para a adoção do código de sensibilidade variacional VARI-1D⁽⁹⁾ utilizado nesta tese. Evidentemente que os tipos de parâmetros calculados pelo código bem como a sua utilização crescente pelos laboratórios americanos ANL e ORNL também influenciaram nesta escolha.

Tendo em vista a necessidade de integrar este código ao sistema de cálculo para reatores rápidos do Instituto de Engenharia Nuclear, foi desenvolvido um programa interface, com o qual foi possível interligá-lo ao sistema CARNAVAL II, possibilitando a utilização das seções de choque multigrupo CADARACHE, versão 2⁽⁵⁾. No apêndice D encontram-se a especificação dos dados de entrada e a listagem do programa.

No capítulo III são descritos os métodos de cálculo e os procedimentos utilizados para o desenvolvimento das análises de sensibilidade.

É feita uma breve apresentação da biblioteca de dados e do código HETAIRE⁽¹⁰⁾, integrantes do sistema CARNAVAL II. São descritas as montagens críticas, selecionadas para este trabalho, sendo justificada as razões que nos levaram a tal escolha e que realmente, consideradas em conjunto, puderam propiciar resultados bastante proveitosos.

São ainda apresentados os sistemas de cálculo utilizados, sendo definidos dois diagramas lógicos, com diversos códigos e programas, para o cálculo de sensibilidades em modo espacial. Com o primeiro estabeleceu-se uma sistemática de cálculo para a determinação de sensibilidades pelo método dire

to, utilizando-se o código MUDE⁽¹¹⁾ e com o segundo, definiu-se uma outra sistemática de cálculo para estimativas de sensibilidade com o formalismo variacional, implementado no código VARI-1D.

Finalmente, neste capítulo, é apresentado o critério adotado para a obtenção dos coeficientes de sensibilidade, obedecendo a uma coerência com a situação atual da biblioteca de dados utilizada.

Nas etapas subsequentes o trabalho se desenvolveu dentro de uma sequência encadeada de procedimentos, de tal modo que os resultados obtidos em uma etapa serviram de subsídios ao desenvolvimento da etapa seguinte.

No capítulo IV é feito um paralelo entre os dois sistemas de cálculo, definidos no capítulo III, utilizando-se a montagem crítica ZPR-3-4B, que possui um espectro intermediário dentro da faixa coberta pelas três montagens críticas selecionadas. São analisadas as sensibilidades integrais do k_{eff} , das razões de taxas de reações centrais σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5} e ainda as dos efeitos em reatividade centrais do U-235, U-238 e Pu-239, para as seções de choque de captura e fissão do U-238 e Pu-239. São analisadas também as sensibilidades do espectro de fluxo direto e adjunto.

No capítulo V é apresentado o desenvolvimento de um estudo sobre a redução do número de grupos de energia para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade, abrangendo importantes estimativas identificadas no capítulo precedente. Neste es-

tudo procurou-se chegar a uma solução conciliatória para os diversos tipos de sensibilidades analisadas, buscando-se uma redução do número de grupos de energia que não compromettesse a precisão das estimativas.

Finalmente, no capítulo VI, são realizados os cálculos dos coeficientes de sensibilidade na estrutura de grupos obtida no capítulo anterior, para as três montagens críticas selecionadas. Estes resultados são condensados em uma estrutura conveniente de macrogrupos de energia, sendo adequadamente apresentados e discutidos. Focaliza-se ainda a problemática envolvida com a utilização de uma estrutura de macrogrupos em um processo de ajuste, apresentando-se uma solução para o retorno das informações à estrutura original de 25 grupos.

CAPÍTULO II

REVISÃO DAS TEORIAS ENVOLVIDAS EM
ANÁLISES DE SENSIBILIDADE

II.1 - Introdução

As análises de sensibilidade, considerando um sentido amplo, visam a determinação de quanto é sensível um valor calculado ou resultado para um dado paramétrico utilizado na obtenção deste resultado. Para o contexto desta tese, os dados paramétricos considerados são as seções de choque multigrupos. A quantidade de interesse é chamada coeficiente de sensibilidade.

Para sua definição, consideremos que a variação $\Delta p/p$ de um parâmetro integral p , correspondente a uma montagem experimental m , resultante da variação de uma seção de choque $\Delta\sigma(x)/\sigma(x)$, pode ser escrita da forma:

$$\frac{\Delta p}{p} = \alpha(x, m, p) \cdot \frac{\Delta\sigma(x)}{\sigma(x)} \quad (\text{II.1})$$

onde:

$\sigma(x)$ é a seção de choque $\sigma(i, r, g)$, para um isótopo i , com uma reação r , em um grupo de energia g .

Portanto:

$$\alpha(x, m, p) = \frac{\Delta p/p}{\Delta\sigma(x)/\sigma(x)} \quad (\text{II.2})$$

A quantidade $\alpha(x,m,p)$ é definida como coeficiente de sensibilidade ou sensibilidade relativa do parâmetro integral p , devido à variação da seção de choque $\sigma(x)$.

Os cálculos destas sensibilidades vem sendo objeto de contínuos estudos e investigações^(6, 12-27) e vários métodos tem sido desenvolvidos para a determinação das variações $\Delta p/p$ dos diversos parâmetros de interesse na área de física de reatores.

Um método adotado a longo tempo e até hoje utilizado é o método direto^(1,13,17-19,22) e consiste basicamente em se calcular por diferença a variação do parâmetro integral, devido à variação da seção de choque, através de dois cálculos, sendo um com as seções de choque originais e o outro com as modificações consideradas. Este método tem a vantagem de poder ser empregado no cálculo da variação de qualquer parâmetro característico do reator, porém apresenta como principal limitação o tempo de cálculo necessário a sua realização, tornando-se impraticável em levantamentos de grandes quantidades de valores de sensibilidade.

Nos demais métodos são utilizados a teoria da perturbação clássica de primeira ordem⁽¹⁴⁾, a teoria da perturbação generalizada^(15,16) ou, ainda, a teoria da perturbação variacional^(21,29). Nas seções subsequentes estas teorias são objeto de uma análise detalhada, tendo em vista constituírem-se os fundamentos teóricos para qualquer estudo de sensibilidade. Particularmente são tratadas as formulações com a aproximação

da teoria da difusão, aplicáveis à configurações críticas homogêneas. Outros pesquisadores tem utilizado aproximações derivadas da teoria da perturbação, aplicadas em conjunção com a teoria de transporte⁽²³⁻²⁷⁾.

Hã portanto várias versões de formulação da teoria da perturbação que diferem na forma das expressões da perturbação, nas aproximações usadas para derivação destas expressões e na terminologia utilizada para referi-las.

A teoria da perturbação foi inicialmente utilizada por Weinberg⁽¹²⁾, para analisar as sensibilidades do k_{eff} . A formulação utilizada constituiu-se a teoria da perturbação clássica de primeira ordem.

Devido à necessidade de cálculos mais sofisticados, que levassem em conta os efeitos espectrais sobre as sensibilidades de parâmetros importantes, como a razão de geração, que a teoria convencional não era capaz de prever, foi introduzida por Usachev⁽¹⁵⁾ e desenvolvida por Gandini⁽¹⁶⁾ uma formulação que denominou-se teoria da perturbação generalizada. Nesta formulação foi utilizado o método das aproximações sucessivas para determinação das sensibilidades das razões de interesse, tendo sido derivada sobre bases de considerações físicas.

A característica fundamental desta teoria é a sua posição feita de que todas as modificações introduzidas no sistema original são tais que não há um efeito líquido em reatividade, sendo suposto que uma alteração é permanentemente introduzida no sistema em estado estacionário, e é tal que este perma-

nece crítico.

Utilizando o formalismo variacional, Stacey^(21,29) derivou expressões similares que permitem alterações que variem o autovalor estático do reator. Esta teoria é considerada pelo seu autor mais geral e mais acurada que a formulação da teoria da perturbação generalizada de Usachev-Gandini, particularmente quando são envolvidas alterações de sistema com substanciais efeitos em reatividade.

A teoria da perturbação variacional é pois uma formulação conveniente para cálculos dos efeitos de alterações sobre parâmetros que são funções do autovalor estático.

A desnecessidade do cálculo dos fluxos direto e adjunto a cada alteração do sistema original, propiciando uma otimização nas estimativas de grandes quantidades de valores de sensibilidade e a possibilidade de uma melhor interpretação física dos fenômenos envolvidos em um sistema alterado, tem tornado cada vez mais atrativo o desenvolvimento e a utilização de técnicas de cálculo formuladas com bases na teoria da perturbação, em suas diversas variantes.

II.2 - Teoria da Perturbação Clássica

Consideremos um reator crítico, descrito pela equação multigrupo com aproximação da difusão, independente do tempo, em notação de operador:

$$\lambda B\phi = A\phi$$

ou

$$(A - \lambda B)\phi = 0$$

(II.3)

onde:

A = operador representando difusão, espalhamento e absorção de nêutrons.

B = operador representando fissão de nêutrons.

$\lambda = k^{-1}$, onde k é a constante de multiplicação efetiva.

ϕ = fluxo de nêutrons, solução da equação (II.3).

A equação adjunta da equação (II.3) pode ser escrita como:

$$\lambda B^*\phi^* = A^*\phi^*$$

ou

$$(A^* - \lambda B^*)\phi^* = 0$$

(II.4)

onde:

A* = operador adjunto de A

B* = operador adjunto de B

ϕ^* = fluxo adjunto de nêutrons, solução da equação (II.4)

que, para uma escolha adequada das condições de contorno, satisfaz as bem conhecidas relações:

$$\langle \phi, A^*\phi^* \rangle = \langle \phi^*, A\phi \rangle$$

e

$$\langle \phi, B^*\phi^* \rangle = \langle \phi^*, B\phi \rangle$$

(II.5)

Por razões de conveniência, uma integração sobre as variáveis contínuas independentes e/ou um somatório sobre as variáveis discretas independentes (espaço, energia e ângulo) se rá denotado por \langle , \rangle , como é convencionalmente feito para cono tar um produto interno de duas funções.

Podemos agora definir um problema alterado^(*), ori undo de modificações nas propriedades do sistema (por exemplo: variação do valor da concentração ou de seções de choque de um ou mais isótopos), tal que o fluxo alterado $\bar{\phi}$ e seu adjunto $\bar{\phi}^*$ satisfaçam, respectivamente, às equações:

$$(\bar{A} - \bar{\lambda}\bar{B})\bar{\phi} = 0 \quad (\text{II.6})$$

$$(\bar{A}^* - \bar{\lambda}\bar{B}^*)\bar{\phi}^* = 0 \quad (\text{II.7})$$

onde:

$$\bar{A} \equiv A + \delta A$$

$$\bar{B} \equiv B + \delta B$$

$$\bar{A}^* \equiv A^* + \delta A^*$$

$$\bar{B}^* \equiv B^* + \delta B^*$$

$$\bar{\lambda} \equiv \lambda + \delta \lambda$$

(II.8)

sendo \bar{A} , \bar{B} , \bar{A}^* , \bar{B}^* os operadores alterados e $\bar{\lambda}$ o autovalor alte rado.

(*) - Por razões de notação, reservamos a expressão "perturbado" para caracterizar as modificações no sistema, definidas como efeitos em reatividade.

Considerando-se o produto interno da equação (II.6) com ϕ^* e subtraindo-se do resultado o produto interno da equação (II.4) com $\bar{\phi}$, obtemos:

$$\langle \phi^*, (\bar{A} - \bar{\lambda}B)\bar{\phi} \rangle - \langle \bar{\phi}, (A^* - \lambda B^*)\phi^* \rangle = 0 \quad (\text{II.9})$$

Tomando-se proveito da propriedade de adjunção dos operadores e operando, obtemos uma expressão exata para $\delta\lambda$:

$$\delta\lambda \equiv \bar{\lambda} - \lambda \equiv \frac{\langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B)\bar{\phi} \rangle}{\langle \phi^*, \bar{B}\bar{\phi} \rangle} \quad (\text{II.10})$$

A equação acima proporciona o conhecimento de $(-\delta\lambda)$, que é o efeito exato da alteração introduzida no sistema, então:

$$\frac{\delta\lambda}{\lambda} = \frac{\langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B)\bar{\phi} \rangle}{\langle \phi^*, \lambda \bar{B}\bar{\phi} \rangle} \quad (\text{II.11})$$

como $\lambda = 1/k$, temos que:

$$\frac{\delta\lambda}{\lambda} = - \frac{\delta k}{k} \quad (\text{II.12})$$

então:

$$\frac{\delta k}{k} = - \frac{\langle \phi^*, \frac{1}{k}(k\delta A - \delta B)\bar{\phi} \rangle}{\langle \phi^*, \frac{1}{k} \bar{B}\bar{\phi} \rangle}$$

ou:

$$\frac{\delta k}{k} = - \frac{\langle \phi^*, (k\delta A - \delta B)\bar{\phi} \rangle}{\langle \phi^*, \bar{B}\bar{\phi} \rangle} \quad (\text{II.13})$$

Se introduzirmos na equação (II.13) a aproximação de primeira ordem da teoria da perturbação, isto é, considerar $\bar{\phi} \equiv \phi$, o que equivale a desprezar os termos de segunda ordem, $\langle \phi^*, (k\delta A - \delta B)\delta\phi \rangle$ e $\langle \phi^*, \bar{B}\delta\phi \rangle$, obtemos:

$$\left(\frac{\delta k}{k}\right)_{\substack{\text{1a.} \\ \text{ordem}}} = - \frac{\langle \phi^*, (k\delta A - \delta B)\phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \delta B)\phi \rangle} \quad (\text{II.14})$$

Este procedimento é usualmente aplicado à estimativa da sensibilidade do k_{eff} , sendo suficientemente acurado, além de proporcionar economia computacional.

II.3 - Teoria da Perturbação Variacional

O propósito de Stacey, aliás em concordância com os que adotam o método das perturbações generalizadas, é evitar o cálculo dos fluxos real e adjunto a cada modificação das propriedades do reator. Com este objetivo, ele emprega o formalismo variacional para a obtenção de expressões acuradas para o cálculo de diversas razões de funcionais em sistema perturbado e/ou alterado, utilizando os fluxos soluções das equações (II.3) e (II.4), que descrevem o sistema original.

II.3.1 - Razões de Funcionais Lineares do Fluxo Real

Quantidades tais como razões de taxas de reações microscópicas e a razão de geração são casos de razões de fun-

cionais lineares do fluxo real.

Consideremos uma razão linear da forma:

$$R = \frac{\langle H_i \phi \rangle}{\langle H_j \phi \rangle} \quad (\text{II.15})$$

onde:

H_i e H_j são operadores lineares escalares avaliados no sistema original, descrito pela equação (II.3).

No caso de razões de taxas de reações, K_i e H_j são seções de choque e os índices i e j referem-se às reações e aos isótopos considerados.

Para um sistema alterado, teremos:

$$\bar{R}[\bar{\phi}] = \frac{\langle \bar{H}_i \bar{\phi} \rangle}{\langle \bar{H}_j \bar{\phi} \rangle} \quad (\text{II.16})$$

onde:

\bar{H}_i e \bar{H}_j são operadores lineares escalares avaliados no sistema alterado, descrito pela equação (II.6).

Uma estimativa de \bar{R} da equação (II.16), usando ϕ em lugar de $\bar{\phi}$, possui erros que são de primeira ordem com referência a $\delta\phi$.

$$\bar{R}_0 = \frac{\langle \bar{H}_i \phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \quad (\text{II.17})$$

Como será visto, a aplicação do formalismo variacional provê uma estimativa muito mais acurada que \bar{R}_0 . Em particular será explicitamente mostrado o fator de correção que leva em conta o efeito da diferença $\delta\phi = \bar{\phi} - \phi$ que este formalismo é capaz de fornecer. Nas referências (28) e (29) Stacey adota procedimentos de Pomraning (30) e Lewins (31,32) para desenvolver as diversas espécies de funcionais variacionais.

A adoção deste critério fornece para \bar{R} uma estimativa variacional do tipo:

$$\bar{R}_V \equiv F[\Gamma^*, \psi] = \frac{\langle \bar{H}_1 \psi \rangle}{\langle \bar{H}_j \psi \rangle} \cdot \left[1 - \langle \Gamma^*, (\bar{A} - \bar{\lambda}B) \psi \rangle \right] \quad (\text{II.18})$$

Aqui, ψ e Γ^* são funções que estruturam o princípio variacional para \bar{R} , sendo chamadas funções de prova.

A função Γ^* induz a complementação da estimativa aproximada fornecida pela equação (II.17) em ψ .

O valor estacionário da funcional F , deduzida da condição de que $\delta F = 0$ para arbitrárias variações das funções de prova, fornece:

$$F \left[\bar{\Gamma}_{\text{estac.}}^*, \bar{\phi} \right] = \bar{R} \left[\bar{\phi} \right] \quad (\text{II.19})$$

sendo $\bar{\Gamma}_{\text{estac.}}^*$ obtida de:

$$(\bar{A}^* - \bar{\lambda}\bar{B}^*)\bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}} = \frac{\bar{H}_1}{\langle \bar{H}_1 \psi \rangle} - \frac{\bar{H}_j}{\langle \bar{H}_j \psi \rangle} \quad (\text{II.20})$$

Assim, a estimativa obtida pela equação (II.18) é acurada até a segunda ordem com relação às diferenças:

$$\bar{\phi} - \psi \text{ e } \bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}} - \Gamma^*$$

Utilizando-se $\bar{\phi}$ como uma função de prova ($\psi = \bar{\phi}$), a equação (II.20) torna-se:

$$(\bar{A}^* - \bar{\lambda}\bar{B}^*)\bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}} = \frac{\bar{H}_1}{\langle \bar{H}_1 \bar{\phi} \rangle} - \frac{\bar{H}_j}{\langle \bar{H}_j \bar{\phi} \rangle} \quad (\text{II.21})$$

De modo a atingir os objetivos do método adotado, com a economia computacional advinda da não computação de $\bar{\phi}$ a cada alteração do sistema, consideremos o fluxo ϕ como uma função de prova ($\psi = \phi$). A equação (II.18) torna-se então:

$$\bar{R}_V = \frac{\langle \bar{H}_1 \phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \left[1 - \langle \Gamma^*, [\delta A - \delta(\lambda B)] \phi \rangle \right] \quad (\text{II.22})$$

podendo a função de prova Γ^* ser estimada a partir de:

$$(\bar{A}^* - \bar{\lambda}\bar{B}^*)\Gamma^* = \frac{H_1}{\langle H_1 \phi \rangle} - \frac{H_j}{\langle H_j \phi \rangle} \quad (\text{II.23})$$

A diferença da equação (II.22) com a equação (II.17), fornece:

$$\bar{R}_V - \bar{R}_O = - \frac{\langle \bar{H}_1 \phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \cdot \langle \bar{\Gamma}^*, [\delta A - \delta(\lambda B)] \phi \rangle \quad (\text{II.24})$$

que é o complemento que introduz a estimativa de \bar{R}_O o efeito da alteração do fluxo ($\delta\phi$), resultante da alteração do sistema original. Para visualização disto, expressemos o segundo fator da equação (II.24) numa forma conveniente. Assim sendo, consideremos o produto interno $\delta\phi$ com a equação (II.20) em ϕ :

$$\langle \bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}}, (\bar{A} - \bar{\lambda}B) \delta\phi \rangle = \left[\frac{\langle \bar{H}_1 \delta\phi \rangle}{\langle \bar{H}_1 \phi \rangle} - \frac{\langle \bar{H}_j \delta\phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \right] \quad (\text{II.25})$$

e o produto interno de $\bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}}$ com a equação em $\delta\phi$, resultante das equações (II.3) e (II.6), usando-se $\bar{\phi} = \phi + \delta\phi$:

$$\langle \bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}}, (\bar{A} - \bar{\lambda}B) \delta\phi \rangle = - \langle \bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}}, [\delta A - \delta(\lambda B)] \phi \rangle \quad (\text{II.26})$$

A diferença das equações (II.25) e (II.26) conduz a:

$$\langle \bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}}, [\delta A - \delta(\lambda B)] \phi \rangle = - \left[\frac{\langle \bar{H}_1 \delta\phi \rangle}{\langle \bar{H}_1 \phi \rangle} - \frac{\langle \bar{H}_j \delta\phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \right] \quad (\text{II.27})$$

Utilizando-se (II.27), a equação (II.24) pode ser expressa como:

$$\bar{R}_V - \bar{R}_O = \frac{\langle \bar{H}_1 \phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \cdot \left[\frac{\langle \bar{H}_1 \delta\phi \rangle}{\langle \bar{H}_1 \phi \rangle} - \frac{\langle \bar{H}_j \delta\phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \right] \quad (\text{II.28})$$

Através da observação da equação (II.28), podemos então facilmente verificar que o segundo termo da equação (II.22) é uma correção que considera os efeitos da alteração sobre o fluxo.

II.3.2 - Razões de Funcionais Bilineares do Fluxo Real e Adjunto

Quantidades tais como efeitos em reatividade, razão de dois destes efeitos, fração efetiva de nêutrons atrasados e tempo de vida de nêutrons prontos são casos típicos de razões funcionais bilineares do fluxo real e adjunto.

Em particular, consideremos para discussão os efeitos em reatividade, os quais transcendem em interesse. Estes efeitos podendo se traduzir por uma perturbação na reatividade do sistema, devido à inserção de uma amostra, movimento de barras de controle, etc...

Consideremos portanto a razão de funcionais bilineares da forma:

$$\rho = \frac{\langle \phi^*, H_i \phi' \rangle}{\langle \phi^*, H_j \phi' \rangle} \quad (\text{II.29})$$

onde:

H_i e H_j são operadores que definem a razão considerada.

Sejam A' e B' os novos operadores oriundos de uma perturbação ΔA e ΔB . Assim, a equação (II.3), perturbada,

passa a se escrever como:

$$(A' - \lambda' B') \phi' = 0 \quad (\text{II.30})$$

onde:

$$\phi' \equiv \phi + \Delta\phi$$

$$A' \equiv A + \Delta A$$

$$B' \equiv B + \Delta B$$

Então, H_i e H_j da equação (II.29) são definidos por:

$$H_i = -\Delta A + \lambda \Delta B \quad (\text{II.31})$$

$$H_j = B'$$

Utilizando-se as equações (II.30) e (II.4) e os fluxos ϕ' e ϕ^* , podendo obter uma expressão exata para $\Delta\lambda$, em procedimento análogo ao realizado para a obtenção da equação (II.10), portanto:

$$\Delta\lambda \equiv \lambda' - \lambda \equiv \frac{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi' \rangle}{\langle \phi^*, B' \phi' \rangle} \quad (\text{II.32})$$

então:

$$\rho = (-\Delta\lambda) = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi' \rangle}{\langle \phi^*, B' \phi' \rangle} \quad (\text{II.33})$$

A equação acima fornece o efeito exato em reatividade à perturbação introduzida no sistema.

Uma estimativa de primeira ordem, oriunda da com

putação de ρ com ϕ em lugar de ϕ' , fornece:

$$\rho_0 = (-\Delta\lambda)_0 = \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B)\phi \rangle} \quad (\text{II.34})$$

A comparação das estimativas das equações (II.33) e (II.34) mostra que:

$$\begin{aligned} \rho - \rho_0 &= \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\phi' \rangle}{\langle \phi^*, B'\phi' \rangle} - \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\phi \rangle}{\langle \phi^*, B'\phi \rangle} = \\ &= \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\phi \rangle + \langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\Delta\phi \rangle}{\langle \phi^*, B'\phi \rangle + \langle \phi^*, B'\Delta\phi \rangle} - \\ &- \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\phi \rangle}{\langle \phi^*, B'\phi \rangle} \end{aligned}$$

então:

$$\begin{aligned} \Delta\rho &= \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\Delta\phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B)\phi \rangle} - \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\phi' \rangle}{\langle \phi^*, B'\phi \rangle} \\ &= \frac{\langle \phi^*, (B + \Delta B)\Delta\phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B)\phi \rangle} - 0(\Delta\phi)^2 \end{aligned} \quad (\text{II.35})$$

Conforme observado, a estimativa do efeito em reatividade por $(-\Delta\lambda)_0$ contém erros que são de primeira ordem com relação à $(\Delta\phi)$. É no entanto desejável ter-se uma estimativa para ρ , superior a primeira ordem, que leve em conta os efeitos da perturbação do fluxo $(\Delta\phi)$, e que contenha apenas erros de segunda ordem em relação à $(\Delta\phi)$.

Portanto, consideremos a equação (II.33) da forma:

$$\rho = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) (\phi + \Delta \phi) \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B) (\phi + \Delta \phi) \rangle} \quad (\text{II.36})$$

Expandindo-se a expressão, utilizando-se a relação de biortogonalidade $\langle \phi^*, B \Delta \phi \rangle = 0$, e eliminando-se os termos acima da segunda ordem em $\Delta \phi$, ΔA e ΔB , obtemos:

$$\rho_1 = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B) \phi \rangle} + \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \Delta \phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B) \phi \rangle} \quad (\text{II.37})$$

O segundo termo desta equação é o fator de correção à ρ_0 que considera o efeito da perturbação do fluxo.

A adoção de uma funcional variacional para razões bilineares desenvolvida por Stacey⁽²⁸⁾, provê uma estimativa do tipo:

$$\rho_v = F_\rho [\psi^*, \Gamma^*, \psi, \Gamma] \equiv \frac{\langle \psi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \psi \rangle}{\langle \psi^*, (B + \Delta B) \psi \rangle} \cdot \left[1 - \langle \psi^*, (A - \lambda B) \Gamma \rangle - \langle \Gamma^*, (A' - \lambda' B') \psi \rangle \right] \quad (\text{II.38})$$

Aqui, ψ , ψ^* , Γ e Γ^* são funções que estruturam o princípio variacional para ρ , sendo chamadas funções de prova. As funções Γ e Γ^* induzem a complementação da estimativa aproximada fornecida pela equação (II.34) em ψ e ψ^* .

O valor estacionário da funcional F_ρ é:

$$\begin{aligned} \Gamma_{\rho \text{ estac.}} &= F_\rho \left[\phi^*, \Gamma_{\text{estac.}}^*; \phi', \Gamma_{\text{estac.}} \right] = \\ &= \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi' \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B) \phi' \rangle} \end{aligned} \quad (\text{II.39})$$

sendo $\Gamma_{\text{estac.}}^*$ e $\Gamma_{\text{estac.}}$ obtidas de:

$$(A - \lambda B) \Gamma_{\text{estac.}} = \frac{(\Delta A - \lambda \Delta B) \psi}{\langle \psi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \psi \rangle} - \frac{B' \psi}{\langle \psi^*, B' \psi \rangle} \quad (\text{II.40})$$

e

$$(A^* - \lambda^* B^*) \Gamma_{\text{estac.}}^* = \frac{(\Delta A^* - \lambda \Delta B^*) \psi^*}{\langle \psi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \psi \rangle} - \frac{B^{*'} \psi^*}{\langle \psi^*, B' \psi \rangle} \quad (\text{II.41})$$

Se as funções ψ, Γ, Γ^* e ψ^* forem usadas como funções de prova, a estimativa obtida com a funcional F_ρ , conforme a equação (II.38), é acurada até a segunda ordem com relação às diferenças:

$$d\phi = \phi' - \psi$$

$$d\Gamma = \Gamma_{\text{estac.}} - \Gamma$$

$$d\Gamma^* = \Gamma_{\text{estac.}}^* - \Gamma^*$$

$$d\phi^* = \phi^* - \psi^*$$

Para o caso em discussão, a equação (II.38) será avaliada utilizando-se o fluxo não perturbado ϕ^* . Então, $\psi^* = \phi^*$, de tal sorte que o segundo termo do colchete desta equação desaparece.

A utilização do fluxo real ϕ como uma função de prova ($\psi = \phi$), na equação (II.38), torna possível a avaliação de ρ_v pela expressão:

$$\rho_v \equiv F_\rho[\phi^*, \Gamma^*, \phi] = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, B' \phi \rangle} \cdot \left\{ 1 - \langle \Gamma^*, [\Delta A - \Delta(\lambda B)] \phi \rangle \right\} \quad (\text{II.42})$$

A diferença da equação (II.42) com a equação (II.34), fornece:

$$\rho_v - \rho_0 = - \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, B' \phi \rangle} \cdot \langle \Gamma^*, [\Delta A - \Delta(\lambda B)] \phi \rangle \quad (\text{II.43})$$

que é um complemento à estimativa de ρ_0 que introduz o efeito da perturbação do fluxo ($\Delta\phi$), resultante do efeito em reatividade, devendo ser portanto equivalente ao segundo termo da equação (II.37), em que ρ foi derivado por uma forma alternativa.

Para verificação desta equivalência, o segundo fator da equação (II.43) deve ser expresso numa forma conveniente. Para tal, consideremos o produto interno de $\Delta\phi$ com a equação (II.41), com ϕ^* e ϕ' tomados como funções de prova;

$$\langle \Gamma^*, (A' - \lambda' B') \Delta\phi \rangle = \frac{\langle \phi^*, [\Delta A - \Delta(\lambda B)] \Delta\phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi' \rangle} \quad (\text{II.44})$$

e o produto interno de Γ^* com a equação em $\Delta\phi$, resultante das equações (II.30) e (II.3), usando $\phi' = \phi + \Delta\phi$:

$$\langle \Gamma^*, (A' - \lambda' B') \Delta \phi \rangle = - \langle \Gamma^*, [\Delta A - \Delta(\lambda B)] \phi \rangle \quad (\text{II.45})$$

A diferença das equações (II.44) e (II.45) conduz à:

$$\langle \Gamma^*, [\Delta A - \Delta(\lambda B)] \phi \rangle = - \frac{\langle \phi^*, [\Delta A - \Delta(\lambda B)] \Delta \phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi' \rangle} \quad (\text{II.46})$$

que induz a uma interpretação física de Γ^* como uma função im-
portância com relação ao efeito da contribuição advinda da per-
tubação do fluxo sobre a reatividade.

Utilizando-se a equação (II.46), a equação (II.43) pode então ser escrita como:

$$\rho_v - \rho_0 = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B) \phi \rangle} \cdot \frac{\langle \phi^*, [\Delta A - \Delta(\lambda B)] \Delta \phi \rangle}{\langle \phi^*, (A - \lambda \Delta B) \phi' \rangle} \quad (\text{II.47})$$

que é equivalente ao segundo termo da equação (II.37) até os termos de segunda ordem em $\Delta \phi$, ΔA e ΔB .

Portanto, ρ pode ser computada de maneira acura-
da através da equação (II.42), sem a necessidade de calcular-
se ϕ' , e com a economia computacional adicional se Γ^* for com-
putada da equação:

$$(A^* - \lambda B^*) \Gamma^* = \frac{(\Delta A^* - \lambda \Delta B^*) \phi^*}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle} - \frac{B^* \phi^*}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} \quad (\text{II.48})$$

tirando-se com isso proveito da propriedade de biortogonalida-
de:

$$\langle \Gamma^*, B\phi \rangle = 0 \quad (\text{II.49})$$

A solução Γ^* é neste caso uma aproximação da solução exata Γ^* estac.

A estimativa variacional apresentada é acurada até a segunda ordem com relação aos erros nas funções de prova utilizadas, apresentando portanto a curacidade até segunda ordem com relação a $(\Delta\phi)$, conforme já demonstrado.

II.3.3 - Efeito em Reatividade em Sistemas Alterados

Consideremos um problema alterado, definido pela equação (II.6) e a equação de perturbação (II.30), que neste sistema alterado passa a se escrever como:

$$(\bar{A}' - \bar{\lambda}'\bar{B}')\bar{\phi}' = 0 \quad (\text{II.50})$$

onde:

$$\bar{A}' = \bar{A} + \bar{\Delta A}$$

$$\bar{B}' = \bar{B} + \bar{\Delta B} \quad (\text{II.51})$$

$$\bar{\lambda}' = \bar{\lambda} + \bar{\Delta\lambda}$$

$\bar{\Delta A}$ e $\bar{\Delta B}$ são as perturbações intrínsecas aos operadores alterados \bar{A} e \bar{B} , e $\bar{\Delta\lambda}$ a perturbação intrínseca ao autovalor alterado $\bar{\lambda}$. $\bar{\Delta A}$ e $\bar{\Delta B}$ podem então ser decompostos em duas parcelas:

$$\bar{\Delta A} = \Delta A + dA \quad (\text{II.52})$$

$$\bar{\Delta B} = \Delta B + dB$$

Portanto, ΔA e ΔB são as frações oriundas da perturbação nos operadores A e B; dA e dB são as alterações in trínsecas da fração perturbada ΔA e ΔB , respectivamente. dA e dB representam, portanto, a diferença na representação da perturbação da reatividade entre os sistemas alterado e original.

Utilizando-se as equações (II.50) e (II.7) e os fluxos $\bar{\phi}^*$ e $\bar{\phi}'$, podemos obter uma expressão exata para $\Delta\lambda$, em procedimento análogo ao realizado para a obtenção da equação (II.10), assim:

$$\overline{\Delta\lambda} = \bar{\lambda}' - \bar{\lambda} = \frac{\langle \bar{\phi}^*, (\overline{\Delta A} - \bar{\lambda} \overline{\Delta B}) \bar{\phi}' \rangle}{\langle \bar{\phi}^*, \bar{B}' \bar{\phi}' \rangle} \quad (II.53)$$

então:

$$\bar{\rho} = (-\overline{\Delta\lambda}) = \frac{\langle \bar{\phi}^*, (\bar{\lambda} \overline{\Delta B}) - \overline{\Delta A} \bar{\phi}' \rangle}{\langle \bar{\phi}^*, \bar{B}' \bar{\phi}' \rangle} \quad (II.54)$$

A equação acima fornece o efeito exato em reatividade do sistema alterado. A computação de $\bar{\rho}$ através da equação (II.54), a cada alteração no sistema, envolve também o cálculo de $\bar{\phi}'$ e $\bar{\phi}^*$ a cada alteração. Este procedimento, apesar de fornecer uma estimativa exata dos valores de ρ alterados, seria por demais oneroso do aspecto computacional.

A adoção de um princípio variacional, análogo ao usado para a obtenção da equação (II.38), provê uma estimativa do tipo:

$$\bar{\rho}_v = (-\overline{\Delta\lambda})_v = \bar{F}_\rho [\psi^*, \Gamma^*, \psi, \Gamma] = \frac{\langle \psi^*, (\bar{\lambda} \overline{\Delta B} - \overline{\Delta A}) \psi \rangle}{\langle \psi^*, \bar{B}' \psi \rangle}$$

$$\cdot \left[1 - \langle \psi^*, (\bar{A} - \bar{\lambda}\bar{B})\Gamma \rangle - \langle \Gamma^*, (\bar{A}' - \bar{\lambda}'\bar{B}')\psi \rangle \right] \quad (\text{II.55})$$

O valor estacionário da funcional \bar{F}_ρ é:

$$\begin{aligned} \bar{F}_{\rho \text{ estac.}} &= \bar{F}_\rho \left[\bar{\phi}^*, \bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}}, \bar{\phi}', \bar{\Gamma}_{\text{estac.}} \right] = \\ &= \frac{\langle \bar{\phi}^*, (\bar{\lambda}\bar{\Delta}\bar{B} - \bar{\Delta}\bar{A})\bar{\phi}' \rangle}{\langle \bar{\phi}^*, (\bar{B} + \bar{\Delta}\bar{B})\bar{\phi}' \rangle} \end{aligned} \quad (\text{II.56})$$

sendo $\bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}}$ e $\bar{\Gamma}_{\text{estac.}}$ obtidas de:

$$(\bar{A} - \bar{\lambda}\bar{B})\bar{\Gamma}_{\text{estac.}} = \frac{(\bar{\Delta}\bar{A} - \bar{\lambda}\bar{\Delta}\bar{B})\psi}{\langle \psi^*, (\bar{\Delta}\bar{A} - \bar{\lambda}\bar{\Delta}\bar{B})\psi \rangle} - \frac{\bar{B}'\psi}{\langle \psi^*, \bar{B}'\psi \rangle} \quad (\text{II.57})$$

e

$$(\bar{A}^* - \bar{\lambda}'\bar{B}^*)\bar{\Gamma}^*_{\text{estac.}} = \frac{(\bar{\Delta}\bar{A}^* - \bar{\lambda}'\bar{\Delta}\bar{B}^*)\psi^*}{\langle \psi^*, (\bar{\Delta}\bar{A} - \bar{\lambda}\bar{\Delta}\bar{B})\psi \rangle} - \frac{\bar{B}^*\psi^*}{\langle \psi^*, \bar{B}'\psi \rangle} \quad (\text{II.58})$$

O cálculo de $\bar{\rho}$ sem a interveniência de $\bar{\phi}'$ e $\bar{\phi}^*$, bem como dos autovalores $\bar{\lambda}$ e $\bar{\lambda}'$, induz conseqüentemente à computação das funções de prova $\bar{\Gamma}^*$ e $\bar{\Gamma}$ utilizando-se $\psi^* = \phi^*$ e $\psi = \phi$.

O ponto de mérito seria o de se evitar a computação de tais funções a cada alteração no sistema. Tirando-se proveito da propriedade de biortogonalidade,

$$\langle \Gamma^*, B\phi \rangle = \langle \phi^*, B\Gamma \rangle = 0 \quad (\text{II.59})$$

pode-se pensar em utilizar Γ e Γ^* em lugar de $\bar{\Gamma}$ e $\bar{\Gamma}^*$. Assim sendo, estas funções seriam computadas somente uma vez, em função

das características do sistema original e da representação da perturbação na reatividade no sistema original. Então, Γ e Γ^* podem ser computados a partir de:

$$(A - \lambda B)\Gamma = \frac{(\Delta A - \lambda \Delta B)\phi}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B)\phi \rangle} - \frac{B\phi}{\langle \phi^*, B\phi \rangle} \quad (\text{II.60})$$

e da equação (II.48).

Utilizando-se os fluxos ϕ e ϕ^* , soluções do sistema original, bem como as funções Γ e Γ^* , estimadas a partir das equações (II.60) e (II.48), podemos computar $\bar{\rho}_v$ a partir de:

$$\bar{\rho}_v = \rho_0 \cdot \bar{h}_v (1 + \bar{f}_v) \quad (\text{II.61})$$

onde ρ_0 é a estimativa de primeira ordem definida pela equação (II.34) e \bar{h}_v é um fator que leva em conta os efeitos da alteração do sistema sobre ρ_0 , portanto, $\rho_0 \bar{h}_v = \bar{\rho}_0$ é a estimativa de primeira ordem do efeito em reatividade no sistema alterado, sendo:

$$\bar{h}_v = \frac{1 - (\delta\lambda)_0 \left[\frac{\langle \phi^*, \Delta B\phi \rangle + \langle \phi^*, dB\phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B)\phi \rangle} \right] + \frac{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B)\phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B)\phi \rangle}}{1 + \frac{\langle \phi^*, \delta B\phi \rangle + \langle \phi^*, dB\phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \Delta B)\phi \rangle}} \quad (\text{II.62})$$

onde $(\delta\lambda)_0$ é a estimativa de primeira ordem de $\delta\lambda$, definido na equação (II.10), ou seja:

$$(\delta\lambda)_0 = \frac{\langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B)\phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \delta B)\phi \rangle} \quad (\text{II.63})$$

\bar{f}_v introduz a estimativa de $\bar{\rho}_v$ correções que consideram o efeito das alterações do sistema original sobre o fluxo real e adjunto, bem como o efeito da perturbação sobre o fluxo real, resultante do próprio efeito em reatividade.

Podemos então considerar:

$$\bar{f}_v = (\bar{f}_{\text{fluxo}})_v + (\bar{f}_{\text{adjunto}})_v \quad (\text{II.64})$$

sendo:

$$\begin{aligned} (\bar{f}_{\text{fluxo}})_v = & - \langle \Gamma^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle - \langle \Gamma^*, (dA - \lambda dB) \phi \rangle - \\ & - \langle \Gamma^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle + \left[(\delta \lambda)_0 - \bar{\rho}_0 \right] \cdot \\ & \cdot \left[\langle \Gamma^*, \delta B \phi \rangle + \langle \Gamma^*, \Delta B \phi \rangle + \langle \Gamma^*, dB \phi \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{II.65})$$

e

$$\begin{aligned} (\bar{f}_{\text{adjunto}})_v = & - \langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B) \Gamma \rangle + \frac{\langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle}{\langle \phi^*, (B + \delta B) \phi \rangle} \cdot \\ & \cdot \langle \phi^*, \delta B \Gamma \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.66})$$

A estimativa de $\bar{\rho}_v$, obtida através da equação (II.61), apresenta a mesma acuracidade que a estimativa de ρ_v da equação (II.42) com relação aos erros introduzidos pelas funções de prova adotadas.

II.4 - Teoria da Perturbação Generalizada

A teoria da perturbação generalizada, de Usachev-

Gandini, visa a determinação dos efeitos que as variações do fluxo e seu adjunto, oriundos das alterações ou perturbações nas propriedades do sistema original, provocam sobre os parâmetros integrais, os quais podem estar sob a forma de funcionais lineares ou bilineares do fluxo e/ou seu adjunto.

Para desenvolvimento desta formulação, Usachev apoiou-se no conceito de que os funcionais acima referidas podem ser relacionadas à funções importâncias que caracterizem-nas para um dado sistema, dependendo tais funções das sucessivas gerações ou ciclos de nêutrons.

Um ciclo acima referido começa pela emissão de nêutrons de fissão e termina com a absorção ou fuga de todos estes nêutrons, consistindo isto uma geração de nêutrons.

A conceituação da função importância, baseada na noção de ciclo neutrônico, propicia uma melhor interpretação física da teoria da perturbação generalizada. Portanto este assunto é apresentado com maiores detalhes no apêndice A.

II.4.1 - Razões de Funcionais Lineares do Fluxo Real

Consideremos pois uma razão linear conforme a equação (II.15).

Observa-se que uma alteração dos dados nucleares, introduzidos no sistema em estado estacionário, não somente pro

duzirá uma alteração nos operadores A e B, como também uma alteração em R, oriundo de variações em ϕ e de possíveis variações em H_i e/ou H_j .

As equações definindo um problema alterado, conforme a conceituação de Gandini, e satisfeitas pelos fluxos alterados $\bar{\phi}$ e $\bar{\phi}^*$, são:

$$(\bar{A} - \lambda \bar{B}) \bar{\phi} = 0 \quad (\text{II.67})$$

e

$$(\bar{A}^* - \lambda \bar{B}^*) \bar{\phi}^* = 0 \quad (\text{II.68})$$

A equação derivada por Usachev para computação da variação em R é:

$$\frac{(\delta R)}{R} \text{gr} = \langle \bar{\phi}, \delta G \rangle - \langle \Gamma_{\text{gr}}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \bar{\phi} \rangle \quad (\dagger) \quad (\text{II.69})$$

sendo:

$$\delta G = \frac{\delta H_i}{\langle H_i, \phi \rangle} - \frac{\delta H_j}{\langle H_j, \phi \rangle} \quad (\text{II.70})$$

e

$$\Gamma_{\text{gr}}^* = \sum_{k=1}^{\infty} \Gamma_{\text{gr}}^*(k) \quad (\text{II.71})$$

onde k é o índice de ciclo e os valores $\Gamma_{\text{gr}}^*(k)$ podendo ser obtidos a partir das equações de recorrência:

$$A^* \Gamma_{\text{gr}}^*(1) = G = \frac{H_i}{\langle H_i, \phi \rangle} - \frac{H_j}{\langle H_j, \phi \rangle} \quad (\text{II.72})$$

$$A^* \Gamma_{\text{gr}}^*(k) = \lambda B^* \Gamma_{\text{gr}}^*(k-1) \text{ para as iterações } k = 2, 3, \dots$$

(†) - O índice gr que acompanha as expressões caracteriza a perturbação generalizada.

A primeira equação (II.72) representa a equação de balanço em importância no primeiro ciclo e a segunda, a equação de balanço em importância em um ciclo genérico de índice k.

Γ_{gr}^* é uma função importância, conforme referida previamente, característica da funcional $R = \frac{\langle H_1 \phi \rangle}{\langle H_j \phi \rangle}$ da equação (II.15), sendo mais propriamente chamada de função importância adjunta generalizada, identificando-se com a função generalizada (Γ^*) definida previamente na formulação variacional.

O primeiro termo do membro direito da equação (II.69) é o efeito direto, fornecendo a estimativa de primeira ordem, enquanto o segundo termo é o efeito espectral, que fornece as influências das variações em ϕ . Este termo é ainda acurado aos termos de primeira ordem se $\bar{\phi}$ é substituído por ϕ .

Adotando-se esta aproximação e utilizando-se a equação (II.70), a expressão para \bar{R}_{gr} derivada da equação (II.69) é:

$$\bar{R}_{gr} = \frac{\langle H_1 \phi \rangle}{\langle H_j \phi \rangle} \left[1 + \frac{\langle \delta H_1 \phi \rangle}{\langle H_1 \phi \rangle} - \frac{\langle \delta H_j \phi \rangle}{\langle H_j \phi \rangle} - \langle \Gamma_{gr}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle \right] \quad (II.73)$$

II.4.2 - Razões de Funcionais Bilineares do Fluxo Real e Adjunto

Em particular será analisado aqui o efeito em reatividade como um parâmetro típico, sob a forma de uma razão acima referida, sendo oriundo da perturbação representada pela inserção de uma amostra no reator.

A equação (II.3), perturbada, passa a se escrever, conforme a conceituação de Gandini, como:

$$(A' - \lambda B')\phi' = 0 \quad (\text{II.74})$$

Neste caso é suposto que as perturbações introduzidas no sistema original são tais que este permanece crítico.

A expressão exata para computação de ρ , baseada na teoria da perturbação clássica é dada pela equação (II.33). Na formulação desenvolvida por Gandini, ρ é estimado a partir de:

$$\rho_{gr} = \rho_{ogr} \left[1 + \langle \phi^* \Delta G \phi \rangle - \langle \Gamma_{gr}^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle \right] \quad (\text{II.75})$$

onde:

$$\rho_{ogr} = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} \quad (\text{II.76})$$

e

$$\Delta G = - \frac{\Delta B}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} \quad (\text{II.77})$$

ρ_{ogr} dada pela equação (II.76) é a estimativa de primeira ordem do efeito em reatividade na formulação Usachev-Gandini.

Substituindo-se ρ_{ogr} e ΔG , a equação (II.75) torna-se :

$$\rho_{gr} = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} \left[1 - \frac{\langle \phi^*, \Delta B \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} - \langle \Gamma_{gr}^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle \right] \quad (\text{II.78})$$

Abandonando-se os termos de segunda ordem em ΔA e

e ΔB , temos então:

$$\rho_{gr} = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} \left[1 - \langle \Gamma_{gr}^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle \right] \quad (\text{II.79})$$

As equações de recorrência neste caso para a obtenção de Γ_{gr}^* são:

$$A^* \Gamma_{gr}^* (1) = \frac{H_i^* \phi^*}{\langle \phi^*, H_i \phi \rangle} - \frac{H_j^* \phi^*}{\langle \phi^*, H_j \phi \rangle} \quad (\text{II.80})$$

$$A^* \Gamma_{gr}^* (k) = \lambda B^* \Gamma_{gr}^* (k-1) \text{ para as iterações } k = 2, 3, \dots$$

onde H_i^* e H_j^* são os operadores adjuntos de H_i e H_j que definem a equação (II.32).

II.4.3 - Efeito em Reatividade em Sistemas Alterados

Consideremos um problema alterado, definido pelas equações (II.67) e (II.74), que neste sistema alterado passa a se escrever como:

$$(\bar{A}' - \lambda \bar{B}') \bar{\phi}' = 0 \quad (\text{II.81})$$

sendo válidas, para esta equação, as definições dadas pelas equações (II.51) e (II.52).

Da formulação desenvolvida por Gandini, o efeito em reatividade em um sistema alterado ($\bar{\rho}_{gr}$) pode ser estimado a partir de:

$$\bar{\rho}_{gr} = \rho_{gr} \left[1 + \langle \phi^* \delta G \phi \rangle - \langle \Gamma_{gr}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle - \langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B) \Gamma_{gr} \rangle \right] \quad (II.82)$$

onde:

ρ_{gr} é dado pela equação (II.79)

e

$$\delta G = \frac{\delta(\Delta A - \lambda \Delta B)}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle} - \frac{\delta B}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} \quad (II.83)$$

Conforme notações já definidas nas equações (II.51) e (II.52), temos que:

$$\delta(\Delta A - \lambda \Delta B) = (dA - \lambda dB) \quad (II.84)$$

Fazendo uso das equações (II.83) e (II.84), a equação (II.82) torna-se:

$$\bar{\rho}_{gr} = \rho_{gr} \left[1 + \frac{\langle \phi^*, (dA - \lambda dB) \phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle} - \frac{\langle \phi^*, \delta B \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} - \langle \Gamma_{gr}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle - \langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B) \Gamma_{gr} \rangle \right] \quad (II.85)$$

A computação da equação (II.85) depende do conhecimento de Γ_{gr} , que é uma função importância generalizada, podendo ser obtida a partir das equações de recorrência:

$$A \Gamma_{gr}(1) = \frac{H_i \phi}{\langle \phi^*, H_i \phi \rangle} - \frac{H_j \phi}{\langle \phi^*, H_j \phi \rangle} \quad (II.86)$$

A $\Gamma_{gr}(k) = \lambda B \Gamma_{gr}(k-1)$ para as iterações $k = 2, 3..$

A função Γ_{gr}^* pode ser obtida pelo mesmo sistema de equações (II.80).

II.5 - Comparação entre a Teoria da Perturbação Variacional e a Teoria da Perturbação Generalizada

Nos itens subsequentes são feitas comparações analíticas entre as estimativas fornecidas pela TPV e TPG^(*), expostas neste capítulo, destacando-se as suas diferenças e particularidades.

II.5.1 - Razões de Taxas de Reações em Sistemas Alterados

Observando-se a equação (II.73) da TPG, notamos que a razão linear alterada (\bar{R}_{gr}) é computada a partir do valor não alterado $R = \langle H_i \phi \rangle / \langle H_j \phi \rangle$. O segundo e terceiro termos entre colchetes representam o efeito direto, isto é:

$$\frac{\langle \delta H_i \phi \rangle}{\langle H_i \phi \rangle} - \frac{\langle \delta H_j \phi \rangle}{\langle H_j \phi \rangle} \cong (\bar{R}_O - R) / R \quad (II.87)$$

(*) - Para fins de simplicidade de redação estamos utilizando as abreviativas:

TPV - teoria da perturbação variacional

TPG - teoria da perturbação generalizada

Utilizando-se a equação (II.87) na equação (II.73), operando-se e abandonando-se os termos de segunda ordem, obtém-se a expressão:

$$\bar{R}_{gr} = \frac{\langle \bar{H}_i \phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \left[1 - \langle \Gamma_{gr}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle \right] \quad (II.88)$$

Por outro lado, a estimativa variacional (\bar{R}_V), dada pela equação (II.22), pode ser escrita como:

$$\bar{R}_V = \frac{\langle \bar{H}_i \phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \left[1 - \langle \Gamma^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle + (\delta \lambda) \langle \Gamma^*, \bar{B} \phi \rangle \right] \quad (II.89)$$

onde $\delta \lambda$ pode ser estimado, na aproximação de primeira ordem, a partir de $(\delta \lambda)_0$, definido na equação (II.63). Porém:

$$(\delta \lambda)_0 \langle \Gamma^*, \bar{B} \phi \rangle = (\delta \lambda)_0 \left[\langle \Gamma^*, B \phi \rangle + \langle \Gamma^*, \delta B \phi \rangle \right] \quad (II.90)$$

e como $\langle \Gamma^*, B \phi \rangle = 0$, temos portanto que:

$$\bar{R}_V = \frac{\langle \bar{H}_i \phi \rangle}{\langle \bar{H}_j \phi \rangle} \left[1 - \langle \Gamma^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle + (\delta \lambda)_0 \langle \Gamma^*, \delta B \phi \rangle \right] \quad (II.91)$$

A comparação das equações (II.88) e (II.91) nos mostra que a diferença entre \bar{R}_V e \bar{R}_{gr} está na presença do termo $+ (\delta \lambda)_0 \langle \Gamma^*, \delta B \phi \rangle$, em \bar{R}_V , o qual faz parte da correção que considera os efeitos da alteração sobre o fluxo. Este termo não tem influência nos casos em que as alterações de sistema não envolvam variações nas propriedades de fissão. Influenciam po-

rêm as estimativas de \bar{R}_V para os casos em que as alterações no sistema provoquem apreciáveis variações na reatividade e no fluxo.

II.5.2 - Efeito em Reatividade

Observando-se as equações (II.34) e (II.76), nota mos inicialmente uma diferença na estimativa de primeira ordem nas expressões dadas pelas duas teorias, embora que esta estimativa seja oriunda da teoria clássica da perturbação. Stacey considera, no denominador da expressão, o operador perturbado B' , enquanto Gandini, baseando-se no fato de que usualmente pequenas perturbações são aplicadas, substitui o operador perturbado B' pelo operador não perturbado B . Realmente, na faixa coberta pelas pequenas perturbações, esta aproximação praticamente não influi sobre os resultados.

A estimativa variacional (ρ_V), dada pela equação (II.42), pode ser escrita da forma:

$$\rho_V = \frac{\langle \phi^*, (\lambda \Delta B - \Delta A) \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle + \langle \phi^*, \Delta B \phi \rangle} \cdot \left[1 - \langle \Gamma^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle + \right. \\ \left. + (\Delta \lambda) \langle \Gamma^*, B' \phi \rangle \right] \quad (II.92)$$

Como $\langle \Gamma^*, B \phi \rangle = 0$ e $(\Delta \lambda)$ pode ser estimado na aproximação de primeira ordem, a partir de $(\Delta \lambda)_0 = -\rho_0$, podemos considerar:

$$\rho_v = \frac{\langle \phi^*, (\lambda\Delta B - \Delta A)\phi \rangle}{\langle \phi^*, B\phi \rangle + \langle \phi^*, \Delta B\phi \rangle} \cdot \left[1 - \langle \Gamma^*, (\Delta A - \lambda\Delta B)\phi \rangle - \rho_o \cdot \langle \Gamma^*, \Delta B\phi \rangle \right] \quad (\text{II.93})$$

A comparação das estimativas de ρ das equações (II.79) e (II.93), excetuando-se a diferença já apontada na estimativa de primeira ordem, nos mostra a presença de um termo adicional, $-\rho_o \langle \Gamma^*, \Delta B\phi \rangle$, o qual faz parte da correção que considera os efeitos da perturbação sobre o fluxo.

Concluimos portanto que ρ_v e ρ_{gr} praticamente se identificam quando a perturbação na reatividade não envolve variações nas propriedades de fissão do sistema. O mesmo já ocorre quando as variações nestas propriedades ou o efeito em reatividade da perturbação são significantes.

II.5.3 - Efeito em Reatividade em Sistemas Alterados

Conforme observado na equação (II.85), da TPG, o efeito em reatividade em sistemas alterados ($\bar{\rho}_{gr}$) é computado a partir do valor não alterado (ρ_{gr}) da equação (II.79).

Substituindo-se ρ_{gr} da equação (II.79) na equação (II.85), vem que:

$$\bar{\rho}_{gr} = \rho_{ogr} \left[1 - \langle \Gamma_{gr}^*, (\Delta A - \lambda\Delta B)\phi \rangle \right].$$

$$\cdot \left[1 + \frac{\langle \phi^*, (dA - \lambda dB) \phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle} - \frac{\langle \phi^*, \delta B \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle} - \right. \\ \left. - \langle \Gamma_{gr}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle - \langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B) \Gamma_{gr} \rangle \right] \quad (II.94)$$

Fatorando a equação (II.94), com arranramento adequado dos termos, podemos escrever, até a segunda ordem em ΔA , ΔB , δA , δA , dA e dB :

$$\bar{\rho}_{gr} = \rho_{ogr} \left[\frac{1 + \frac{\langle \phi^*, (dA - \lambda dB) \phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle}}{1 + \frac{\langle \phi^*, \delta B \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle}} \right] \cdot \left[1 - \langle \Gamma_{gr}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle - \right. \\ \left. - \langle \Gamma_{gr}^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle - \langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B) \Gamma_{gr} \rangle \right] \quad (II.95)$$

A expressão de $\bar{\rho}_{gr}$, dada pela equação (II.95), está numa forma que já possibilita comparações com a formulação da TPV. Em notação equivalente com aquela, podemos considerar:

$$\bar{\rho}_{gr} = \rho_{ogr} \cdot \bar{h}_{gr} \cdot (1 + \bar{f}_{gr}) \quad (II.96)$$

sendo:

$$\bar{h}_{gr} = \frac{1 + \frac{\langle \phi^*, (dA - \lambda dB) \phi \rangle}{\langle \phi^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle}}{1 + \frac{\langle \phi^*, \delta B \phi \rangle}{\langle \phi^*, B \phi \rangle}} \quad (II.97)$$

e

$$\bar{f}_{gr} = (\bar{f}_{fluxo})_{gr} + (\bar{f}_{adjunto})_{gr} \quad (II.98)$$

onde:

$$(\bar{f}_{\text{fluxo}})_{\text{gr}} = - \langle \Gamma_{\text{gr}}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle - \langle \Gamma_{\text{gr}}^*, (\Delta A - \lambda \Delta B) \phi \rangle \quad (\text{II.99})$$

e

$$(\bar{f}_{\text{adjunto}})_{\text{gr}} = - \langle \phi^*, (\delta A - \lambda \delta B) \Gamma_{\text{gr}} \rangle \quad (\text{II.100})$$

Podemos agora estabelecer comparações entre as estimativas $\bar{\rho}_{\text{gr}}$ e $\bar{\rho}_{\text{v}}$, através dos seus termos integrantes, definidos anteriormente. Assim sendo, temos:

1º) termo (\bar{h}):

O confronto das equações (II.62) e (II.97) nos mostra que o termo constituindo o efeito em reatividade da alteração introduzida no sistema ($\delta\lambda$), presente em \bar{h}_{v} sob a forma da aproximação de primeira ordem $(\delta\lambda)_0$, não consta de \bar{h}_{gr} . A perturbação ΔB , relativa ao operador de fissão B, bem como a sua variação δB , devido a alteração no sistema, também não aparecem no denominador de \bar{h}_{gr} .

2º) termo (\bar{f}_{fluxo}):

A comparação das equações (II.65) e (II.99) nos indica que o termo constituindo o efeito em reatividade da alteração introduzida no sistema ($\delta\lambda$), presente em $(\bar{f}_{\text{fluxo}})_{\text{v}}$ sob a forma da aproximação de primeira ordem $(\delta\lambda)_0$, bem como a estimativa de primeira ordem do efeito em reatividade no sistema alterado ($\bar{\rho}_0$), não constam de $(\bar{f}_{\text{fluxo}})_{\text{gr}}$. O termo $-\langle \Gamma_{\text{gr}}^*, (\delta A - \lambda \delta B) \phi \rangle$, que complementa a estimativa de $(\bar{f}_{\text{fluxo}})_{\text{v}}$, no que diz respeito às alterações intrínsecas das frações perturbadas ΔA e ΔB , tam

bem não aparece em $(\bar{f}_{fluxo})_{gr}$.

3º) termo $(\bar{f}_{adjunto})$:

O confronto das equações (II.66) e (II.100) nos mostra que o termo $(\delta\lambda)_0$, presente em $(\bar{f}_{adjunto})_v$, não consta de $(\bar{f}_{adjunto})_{gr}$.

Com a discussão precedente procurou-se facilitar a visualização da natureza física das diferenças entre a TPV e TPG e ainda prover uma indicação qualitativa de, em que situações estas diferenças possam ter uma certa influência sobre os resultados.

CAPÍTULO III

MÉTODOS DE CÁLCULO E PROCEDIMENTOS

III.1 - Biblioteca de Dados Utilizada

O jogo de seções de choque utilizado neste trabalho é aquele proveniente do sistema de cálculo denominado formulário CARNAVAL II⁽⁵⁾, entendendo-se como formulário o conjunto de métodos de cálculo e dados de base.

Este sistema de cálculo, de aplicação particular à física de reatores rápidos, vem sendo empregado pelo CEA (Commissariat à l'Energie Atomique-França) e também pelo IEN (Instituto de Engenharia Nuclear-Brasil) como parte de um acordo de cooperação.

No jogo de seções eficazes multigrupos do formulário CARNAVAL II somente as seções eficazes de moderação elástica são tratadas a 660 grupos de energia. As demais seções de choque são tratadas a 25 grupos, tendo-se em conta a utilização dos fatores de autoproteção à ressonância. A estrutura de grupos é mostrada na tabela (III.1).

O formulário CARNAVAL II compõe-se então de :

a) Biblioteca de seções de choque à diluição infinita, a 25 gru

TABELA III.1 - ESTRUTURA MULTIGRUPO E FLUXO PADRÃO DO SISTEMA CARNAVAL II

GRUPO	ENERGIA SUPERIOR DO GRUPO	Δu	FLUXO PADRÃO
1	14,50 MeV	1,37	Espectro de fissão
2	3,68 MeV	0,50	Espectro de fissão
3	2,23 MeV	0,50	E-2
4	1,35 MeV	0,50	E-2
5	821 KeV	0,50	E-2
6	498 KeV	0,50	E-1
7	302 KeV	0,50	E-1
8	183 KeV	0,50	E-1
9	111 KeV	0,50	E-1
10	67,4 KeV	0,50	E-1
11	40,9 KeV	0,50	E-1/2
12	24,8 KeV	0,50	E-1/2
13	15,0 KeV	0,50	E-1/2
14	9,12 KeV	0,50	E-1/2
15	5,53 KeV	0,50	E-1/2
16	3,36 KeV	0,50	E-1/2
17	2,04 KeV	0,50	E-1/2
18	1,23 KeV	0,50	E ⁰
19	748 eV	0,50	E ⁰
20	454 eV	0,50	E ⁰
21	275 eV	1,00	E ⁰
22	101 eV	1,50	E ⁰
23	22,6 eV	2,00	E ⁺¹
24	3,06 eV	2,00	E ⁺¹
25	TÉRMICA	-	MAXWELL

pos, desde a energia térmica a 14,5 MeV.

b) Biblioteca de seções de choque a 660 grupos para a moderação elástica, referente aos elementos leves, entre 0,4 eV e 2MeV.

c) Fatores de autoproteção em função da diluição e da temperatura para elementos ressonantes, entre 0,4 eV e 67 KeV para os elementos pesados e entre 100 eV e 1,4 MeV para os elementos leves.

d) Código de cálculo de célula (HETAIRE) (5,10)

III.1.1 - Código HETAIRE

O código HETAIRE efetua o cálculo dos parâmetros neutrônicos de células complexas em Modo Fundamental, sendo feito a uma dimensão, para as geometrias plana e cilíndrica, e a duas dimensões, apenas para a geometria cilíndrica.

A equação de transporte é resolvida na aproximação P_1 não consistente, utilizando-se o formalismo das probabilidades de colisão e a criticalidade é alcançada mediante a pesquisa do "buckling" material (B^2), crítico.

Podemos diferenciar os cálculos realizados pelo HETAIRE em duas etapas distintas: cálculo homogêneo e cálculo heterogêneo. Com o primeiro é determinado o fluxo da célula homogeneizada e com o segundo é resolvida a equação de transporte in

tegral. Informações sobre os procedimentos seguidos por estes cálculos são apresentados no apêndice B.

III.2 - Descrição das Montagens Experimentais

As montagens experimentais selecionadas para este trabalho são: ZPR-3-48⁽³³⁾, ZPR-3-49⁽³⁴⁾ e ZPR-3-50⁽³⁵⁾.

A primeira destas tem sido submetida à comparações de técnicas de cálculo por vários laboratórios e faz parte do conjunto de montagens críticas rápidas reunidas pelo Grupo de Trabalho de Avaliação de Seções de Choque do BNL(EUA)⁽³⁶⁾.

Este modelo possui um especial interesse, por ter um espectro de fluxo direto e adjunto similar daqueles esperados em reatores rápidos de potência, com razoável carregamento de plutônio, mantendo porém simplicidade em sua composição e arranjo.

Os materiais constituintes do núcleo são limitados à: plutônio, urânio empobrecido, sódio (25%), grafite e aço inoxidável. O grafite foi incluído com a finalidade de amolecer o espectro de nêutrons. A razão de átomos do carregamento urânio-plutônio no núcleo é de 4:2.

Pelas razões expostas, esta montagem foi escolhida para os nossos estudos de referência.

Os reatores ZPR-3-49 e ZPR-3-50 foram também sele

cionados devido a apresentarem interessantes características.

Estas configurações críticas assim reunidas tem permitido o isolamento de incertezas em diversas bibliotecas de dados e interessantes comparações de métodos de cálculo^(37,38).

O ZPR-3-49 é uma variante do anterior, apresentando como diferença básica a ausência do sódio em sua composição.

No ZPR-3-50 o espaço ocupado pelo sódio foi preenchido com carbono, o que induziu a um amolecimento do seu espectro.

As três montagens tomadas juntamente cobrem uma faixa razoável do parâmetro $r^{(*)}$, característico da dureza do espectro, conforme pode ser observado na tabela (III.2) e na figura (III.1), onde foram plotados os valores médios das seções de choque do U-238 de suas células representativas, em função do parâmetro r . O ZPR-3-48 apresenta um valor intermediário nesta faixa.

A este ponto cabe esclarecer que é conveniente nos mantermos próximo da faixa de espectro coberta pelo reator PHENIX, visto que foi este o reator de referência para o qual a biblioteca que ora estamos utilizando foi previamente manipulada. A faixa do parâmetro r abrangida pelo PHENIX também consta da tabela (III.2), para fins de comparações.

(*) - O parâmetro r sendo definido como a razão entre o valor médio da produção de nêutrons ($\overline{\nu\Sigma_f}$) e o valor médio do poder de moderação ($\overline{\xi\Sigma_g}$).

A consideração, em certas técnicas de ajuste, de correlações entre os valores dos parâmetros integrais⁽³⁹⁾, em adição daquelas já comumente utilizadas (correlações entre valores de seções de choque), confere uma particular importância aos modelos críticos variantes, tendo em vista o fato de com eles tornar-se mais fácil o estabelecimento destas correlações.

Com as montagens críticas adotadas, também será possível uma melhor interpretação das sensibilidades analisadas como um conjunto.

As suas composições homogêneas e dimensões, para a geometria esférica⁽³⁸⁾, se encontram na tabela (III.3).

TABELA III.2 - ESPECTRO DAS MONTAGENS CRÍTICAS

MONTAGEM	PARÂMETRO r
ZPR-3-50	0,315
ZPR-3-48	0,404
ZPR-3-49	0,446
PHENIX	0,37-0,47

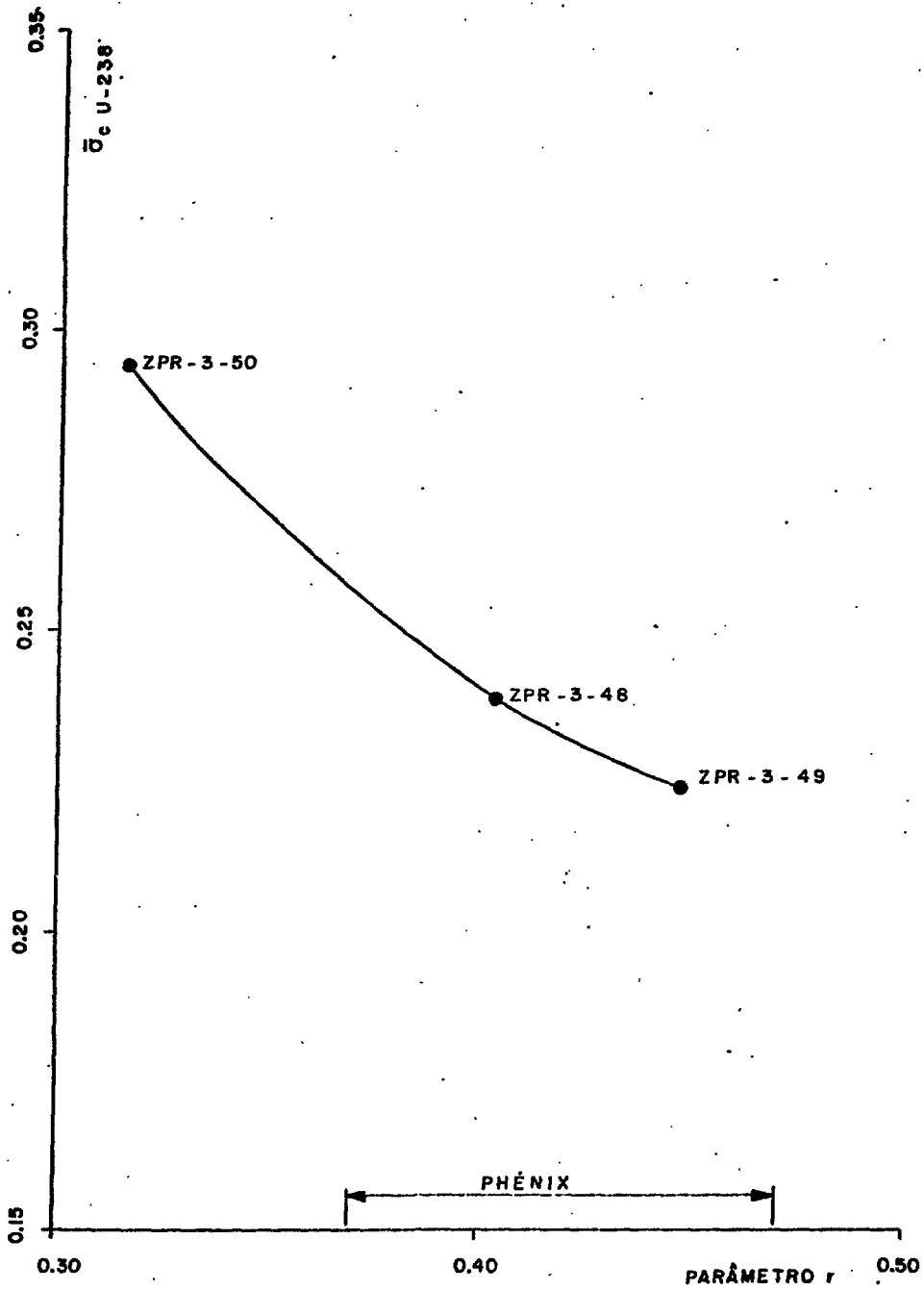


FIG. III.1 - SEÇÃO DE CHOQUE MÉDIA DE CAPTURA DO U-238 EM FUNÇÃO DO PARÂMETRO r , NO ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49

TABELA III.3 - COMPOSIÇÕES HOMOGÊNEAS DOS MODELOS ESFÉRICOS DAS MONTAGENS EXPERIMENTAIS UTILIZADAS NOS CÁLCULOS

ISÓTOPO	CONCENTRAÇÕES (ÁTOMOS/cm ³ x 10 ⁻²⁴)					
	ZPR-3-48		ZPR-3-49		ZPR-3-50	
	NÚCLEO	COBERTURA	NÚCLEO	COBERTURA	NÚCLEO	COBERTURA
U-235	0,000016	0,000083	0,000016	0,000083	0,000016	0,000083
U-238	0,007405	0,039690	0,007406	0,039556	0,007404	0,039613
Pu-239	0,001645	-	0,001644	-	0,001645	-
Pu-240	0,000106	-	0,000106	-	0,000106	-
Pu-241	0,000011	-	0,000011	-	0,000011	-
Pu-242	0,0000004	-	0,0000004	-	0,0000004	-
C	0,020770	-	0,020766	-	0,04594	-
Na	0,006231	-	-	-	-	-
Al	0,000109	-	0,000109	-	0,00011	-
Cr	0,002531	0,001225	0,002508	0,001242	0,001816	0,001161
Fe	0,010180	0,004925	0,010083	0,004626	0,0073	0,004671
Ni	0,001119	0,000536	0,001121	0,000611	0,000796	0,000508
Mo	0,000206	0,000051	0,000206	-	0,000205	-
Mn	0,000106	0,000060	0,000105	-	0,000076	0,000048
Si	0,000124	-	-	-	-	-
Dist. do Centro À Fronteira Exterior (cm)	45,245	75,245	47,53	83,96	43,43	83,77

III.3 - Parâmetros Utilizados para Análise de Dados e Estudos de Sensibilidade

Os melhoramentos dos métodos de cálculo, os testes de consistência da vasta coleção de dados nucleares, bem como o seu refinamento, por métodos estatísticos de ajuste, vem sendo possível através de comparações e correlações entre valores de um certo conjunto de parâmetros que podem ser determinados experimentalmente nas montagens críticas.

O número de parâmetros que podem ser medidos em uma montagem depende da imaginação criativa do físico experimental.

Em geral, os parâmetros mais utilizados são (40,41,1)

- "buckling" material
- K^* , definido como a razão entre produção e absorção no cálculo de célula em modo assintótico
- razões de taxas de reações
- massa crítica
- efeito em reatividade
- espectro.

Para as comparações, correlações e processos de ajuste os parâmetros importantes são aqueles que podem ser determinados com uma precisão de medida elevada e que permitam uma análise do balanço em um meio infinito.

No passado, uma grande ênfase foi dada às medidas dos parâmetros sensíveis ao espectro (índices espectrais), com a finalidade de se conseguir deste uma análise detalhada.

As razões de taxas de fissões são os índices espectrais mais bem conhecidos e utilizados.

Devido ao melhor comportamento da seção de choque de fissão do Pu-239 com a energia, em relação aos demais isótopos, seria preferível que este isótopo participasse da taxa de fissão do denominador dessas razões. Tendo em vista porém que a maioria das seções de choque de fissão e captura são usualmente medidas utilizando-se as seções de choque de fissão do U-235, que é mais bem conhecida e possui menores incertezas que a do Pu-239⁽²⁾, há fortes razões para a adoção desse isótopo, pois assim procedendo, os efeitos das incertezas oriundas dos dados nucleares tendem a se minimizarem.

Devido à prioridade que vem sendo destinada à análise do balanço neutrônico nas montagens críticas rápidas, grande importância tem sido dada às determinações experimentais das razões de taxas de reações σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f8}/σ_{f5} e σ_{f9}/σ_{f5} , as quais, sendo medidas com uma precisão de 1% a 2%⁽⁴¹⁾, tem permitido uma análise bastante detalhada deste balanço.

Os efeitos em reatividade sendo parâmetros que possuem uma relativa dependência dos espectros direto e adjunto, fornecendo informações relativas ao produto de ambos, podem ser considerados como índices espectrais. A dificuldade em utilizá-los reside em se conseguir analisar separadamente a influência de ambos os espectros envolvidos. Com a utilização da teoria da perturbação generalizada^(15,16) ou o formalismo variacional de Stacey^(21,29) é possível no entanto analisar-se esses efeitos separadamente, conforme temos visto no capítulo II.

Devido aos atuais refinamentos nas medidas de espectrometria neutrônica por prótons de recuo e por tempo de voo efetuados nos últimos anos, vem diminuindo a importância dos valores experimentais dos parâmetros em geral, com a finalidade de análise do espectro. No entanto, o interesse por esses valores permanece, principalmente daqueles ao centro do núcleo, tendo em vista a sua utilidade nas análises comparativas e correlações, com fins de testar os dados nucleares e identificar os erros nas seções de choque.

Pequenos erros nas seções de choque do U-238 podem provocar grandes incertezas nos efeitos em reatividade deste isótopo⁽⁴²⁾.

Os efeitos em reatividade do U-235 e Pu-239 são parâmetros bastante medidos nas montagens críticas, devido a sua importância no projeto e avaliação neutrônica dos reatores rápidos. Na referência (42) podemos observar que estes efeitos para o U-235 tem sido medidos com um erro de aproximadamente 1,5%, embora que, em caráter mais geral, possamos considerar as medidas desses parâmetros com um erro na faixa de 3% a 5%, dependendo do material^(43,44).

Importante é ressaltar ainda que em uma análise⁽⁴⁵⁾ envolvendo um número superior à 100 correlações visando identificar as causas mais prováveis das discrepâncias entre valores calculados e medidos de efeitos em reatividade, entre outras conclusões, foi observado que estas discrepâncias são maiores para as montagens a Plutônio do que para as de Urânio.

Considerando-se que as montagens experimentais se lecionadas para este trabalho possuem combustível a base de Plu_tônio e levando-se em conta o que já tem sido comentado, há boas razões para incluir entre os parâmetros envolvidos nas análises de sensibilidade efeitos, em reatividade como os do U-235, U-238 e Pu-239, porém, principalmente os do U-235, devido ser este isótopo considerado como referência.

Por razões que o texto justifica, são estudados também as razões de taxas de reações centrais (*) σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5} .

Sendo os cálculos realizados em Modo Espacial, o k_{eff} é também um parâmetro importante a ser considerado.

No apêndice C encontram-se os valores experimentais e calculados dos parâmetros integrais utilizados.

III.4 - Sistemas de Cálculo

Os sistemas de cálculo descritos a seguir visam caracterizar os procedimentos computacionais adotados nas análises de sensibilidade desta tese.

Os cálculos foram realizados em Modo Espacial, considerando-se a teoria da difusão multigrupo a uma dimensão.

(*) - A palavra "central" que complementa a denominação dos parâmetros integrais considerados neste trabalho visa esclarecer que os valores medidos ou calculados desses parâmetros foram considerados ao centro do núcleo das montagens críticas.

Inicialmente, com as concentrações homogêneas apresentadas na tabela (III.3), foram realizados os cálculos de célula, com o código HETAIRE⁽¹⁰⁾, do núcleo de cada montagem e a seguir da cobertura, utilizando-se neste último, como entrada adicional de dados, a fonte originária do núcleo (F_g), sendo:

$$F_g = D_g \cdot \phi_g$$

onde:

D_g é o coeficiente de difusão no g-ésimo grupo de energia.

ϕ_g é o fluxo da célula homogeneizada no g-ésimo grupo de energia.

Esta fonte assim introduzida visa propiciar um cálculo mais realístico dos meios subcríticos⁽¹⁰⁾.

As seções de choque microscópicas homogeneizadas, características de cada meio, assim obtidas, foram utilizadas em um cálculo espacial prévio, utilizando-se a teoria da difusão em multigrupo, com o código MUDE⁽¹¹⁾. Considerou-se neste cálculo a geometria esférica e as dimensões iniciais apresentadas na tabela (III.3). A opção considerada foi a busca de fronteiras críticas para $k_{\text{eff}} = 1.0$, conservando-se como fixa a espessura da cobertura.

Nos procedimentos adotados para os cálculos de sensibilidade em Modo Espacial, duas sistemáticas foram utilizadas, que são descritas a seguir.

III.4.1 - Cálculos Utilizando o Método Direto

Os passos para este cálculo, embora bastante simples, envolvem um grande volume de trabalho computacional, tornando-se impraticável em levantamentos de grandes quantidades de valores de sensibilidade. Entretanto cabe ressaltar que os valores obtidos com este procedimento são considerados suficientemente exatos. Deste modo servem como referenciais na verificação da qualidade de resultados obtidos por outros métodos.

Primeiramente executa-se um cálculo de difusão a uma dimensão com o código MUDE, com as fronteiras críticas. Os valores assim obtidos dos parâmetros integrais constituem-se os valores de referência.

É utilizado a seguir o programa COBRAC⁽⁴⁶⁾ para modificar as seções de choque de interesse e todo o conjunto é então regravado. Em sequência, acessa-se o arquivo contendo as seções de choque do núcleo e da cobertura, modificadas pelo COBRAC e efetua-se um novo cálculo com o código MUDE. Os valores dos parâmetros integrais assim obtidos constituem-se os valores alterados.

A diferença entre os valores fornecidos pelos dois cálculos, para os diversos parâmetros integrais, fornece a variação destes parâmetros para as variações consideradas nas seções de choque, e os coeficientes de sensibilidade são calculados através da equação (II.2).

O diagrama lógico deste sistema de cálculo é mostrado na figura (III.2).

III.4.2 - Cálculos Utilizando a Teoria Variacional

Este sistema de cálculo foi definido visando a utilização do código de sensibilidade variacional VARI-1D⁽⁹⁾.

Este código foi desenvolvido originalmente no ANL, sendo lá utilizado acoplado a um complexo sistema de cálculo denominado sistema ARC⁽⁴⁷⁾, de onde são coletados e preparados todos os dados nucleares necessários à resolução de um problema.

Sua estrutura é baseada na teoria da difusão multigrupo a uma dimensão, com implementação de um formalismo variacional desenvolvido por Stacey^(21,29), podendo ser usado opcionalmente para a geometria plana, esférica ou cilíndrica.

O código computa, através da estimativa variacional, as sensibilidades de:

efeito em reatividade

razão de taxas de reações

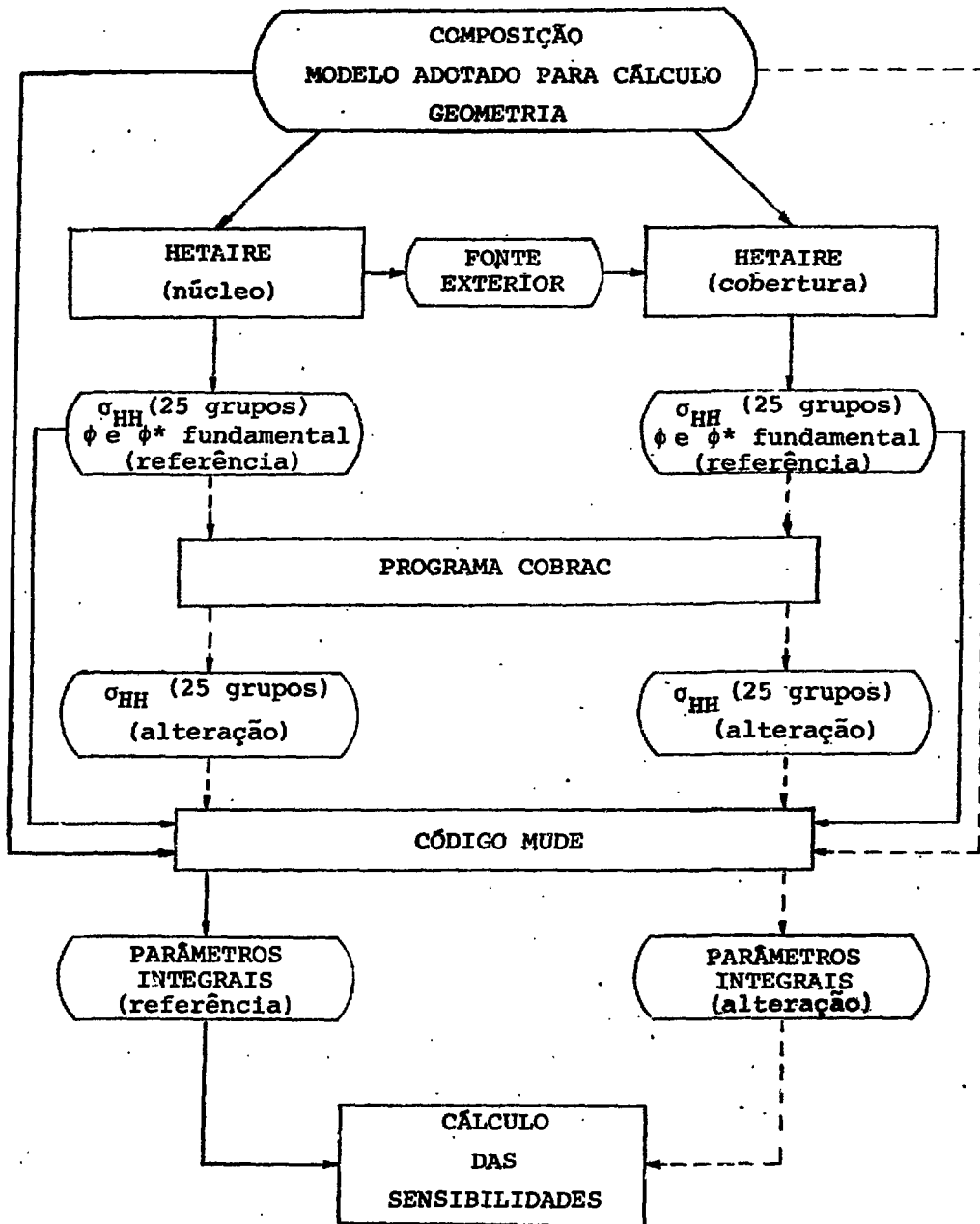
razão de geração

tempo de vida dos nêutrons prontos

eficiência dos nêutrons atrasados

fração de potência

razão de integrais de fluxos



— procedimentos e valores - referência
- - - procedimentos e valores - alteração

FIG. III.2 - DIAGRAMA LÓGICO PARA CÁLCULOS DE SENSIBILIDADE EM MODO ESPACIAL - CÓDIGO MUDE

As sensibilidades são computadas para variações nos dados nucleares ou nas concentrações isotópicas. É fornecido também a estimativa de primeira ordem do k_{eff} para tais variações.

Uma detalhada análise do formalismo variacional para cálculos de sensibilidade, referente aos parâmetros integrais abordados nesta tese, foi apresentada no capítulo II.

Por fornecer os valores de sensibilidade com uma alta precisão, este código tem uso corrente nos laboratórios ANL e ORNL.

Os passos iniciais, utilizando o sistema de cálculo com o VARI-1D, seguem os mesmos procedimentos já citados, no que concerne à preparação de dados a partir de cálculos de célula dos meios considerados. Neste caso, porém, não se utilizou o programa COBRAC para alterar as seções de choque, tendo sido considerado uma opção própria do código, para este tipo de cálculo.

Para a utilização dos dados nucleares do sistema CARNAVAL II, fornecidos através do código HETAIRE, foi desenvolvido o programa interface HETAVARI8. Este programa lê, no complexo conjunto de dados registrados na fita HETAIRE, as seções de choque microscópicas homogeneizadas do núcleo e da cobertura do reator considerado, preparando um novo conjunto de seções de choque microscópicas, adequadas à entrada do código. Neste estágio, são complementadas, a partir dos dados lidos, certas informações não disponíveis, porém indispensáveis ao VARI-1D, como as seções de choque de remoção e de "downscatter".

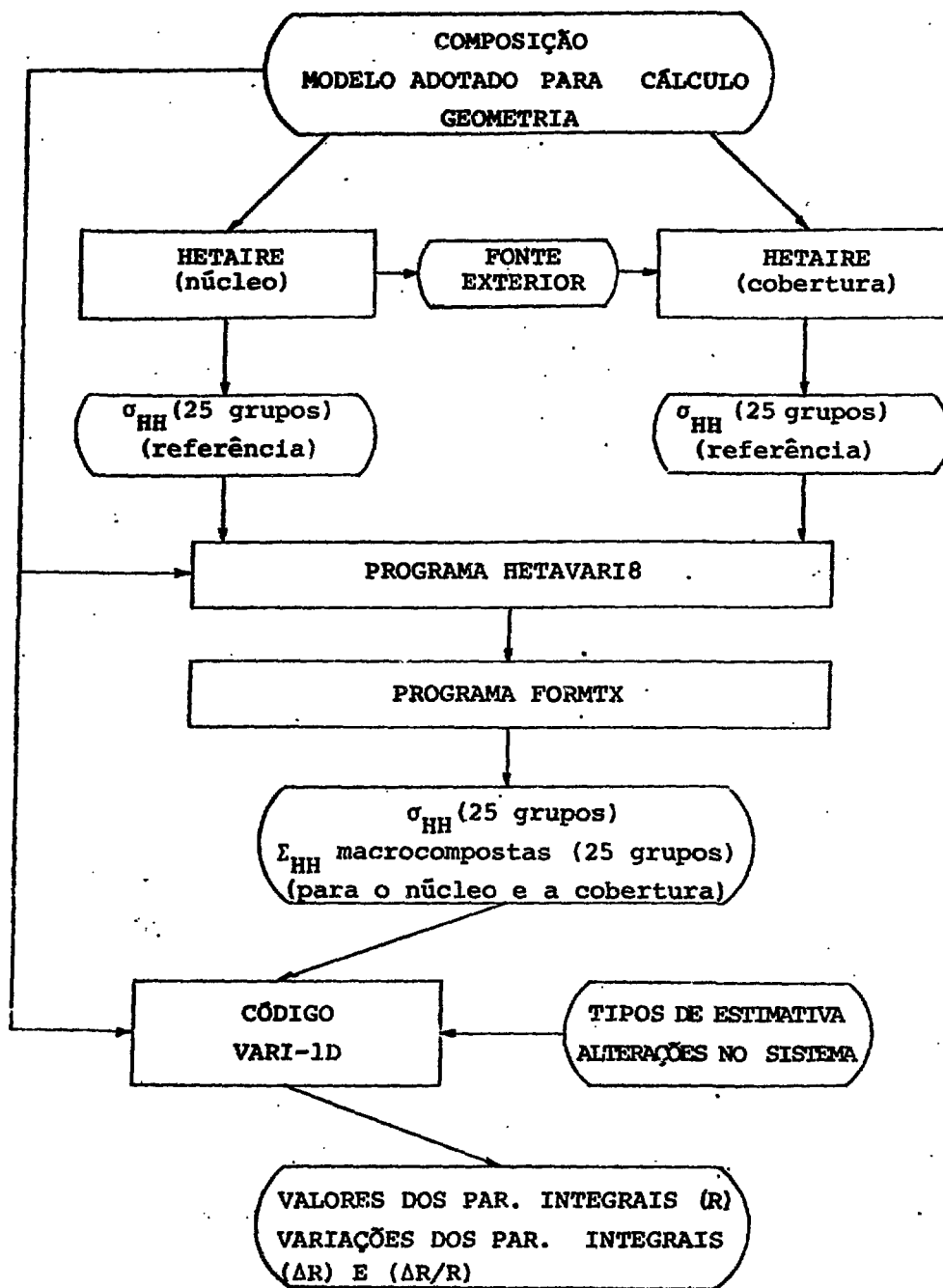


FIG. III. 3 - DIAGRAMA LÓGICO PARA CÁLCULOS DE SENSIBILIDADE EM MODO ESPACIAL - CÓDIGO VARI-1D

São preparadas também seções de choque macroscópicas compostas, características de vários isótopos tomados juntamente, tanto do núcleo como da cobertura.

As seções de choque que caracterizam os parâmetros integrais, bem como aquelas para as quais variações vão ser aplicadas, são consideradas sob a forma microscópica.

Os dados assim preparados, conforme especificações de entrada do código, são em sequência lidos pelo programa FORMIX que os coloca no formato definitivo de leitura do código VARI-1D, mantendo a mesma precisão das seções de choque oriundas do HETAIRE. Finalmente estes dados são locados em uma área em disco ou fita para serem acessados posteriormente pelo código VARI-1D.

A especificação dos dados de entrada e os programas em FORTRAN encontram-se no apêndice D.

O diagrama lógico deste sistema de cálculo é mostrado na figura (III.3).

III.5 - Critério Adotado para a Obtenção dos Coeficientes de Sensibilidade

No capítulo II e na seção III.4 temos visto os aspectos teóricos e sistemas de cálculo envolvidos na determinação da variação $\Delta p/p$ de um parâmetro integral em relação a uma variação $\Delta \sigma/\sigma$ de uma determinada seção de choque. As quantida-

des acima citadas definem o coeficiente de sensibilidade, referido na equação (II.2).

Para a obtenção destes coeficientes, a serem utilizados em um ajuste estatístico, após a escolha do número de grupos de energia e a seleção das reações envolvidas, uma variação uniforme é feita em cada grupo.

Nos laboratórios americanos ARGONNE⁽⁴⁸⁾ e OAK RIDGE⁽²⁶⁾ é normalmente adotado +1% de variação sobre as seções de choque. Hideki Takano⁽⁴⁹⁾, do Instituto de Pesquisa de Energia Atômica do Japão, obtém esses coeficientes adotando +10% de variação em cada grupo de energia.

Se a aproximação de primeira ordem é considerada, estamos aceitando um fenômeno de linearidade de larga amplitude numa gama de variações. Neste caso, os coeficientes de sensibilidade de $\alpha(x,m,p)$ independem das variações aplicadas.

Normalmente uma aproximação mais acurada que a primeira ordem é adotada, assim sendo, esses coeficientes mostrar-se-ão sensíveis à amplitude das variações a serem aplicadas.

Mesmo utilizando-se o processo variacional, é comum aceitar-se a linearidade para obter-se, a partir dos coeficientes de sensibilidade, as variações nos parâmetros ou nas seções de choque, para variações diferentes daquelas em que estes valores foram originalmente obtidos⁽⁶⁾.

Para a determinação desses coeficientes duas limita

ções podem ser consideradas. A primeira diz respeito à faixa de incerteza das medidas de seções de choque, pois as variações a serem aplicadas não devem ser superiores aos valores destas incertezas. A segunda refere-se à faixa permitida para variações nas seções de choque em função das aproximações consideradas nos métodos de cálculo.

De um modo geral, esses coeficientes não são avaliados exatamente, tendo em vista as aproximações inerentes aos vários métodos e teorias utilizados, conforme já temos visto no capítulo II.

Observando-se os resultados publicados por BARRÉ⁽⁷⁾, referentes às correções obtidas pelo processo de ajuste, aqui reproduzidos na tabela (III.4), relativos à biblioteca de dados CADA RACHE - versão 2, concluímos que, em se lidando com um jogo de seções de choque multigrupos em início de evolução, como este citado e que também estamos utilizando, grandes alterações ainda são imperativas à diversas seções de choque. Portanto, resolvemos adotar neste trabalho o mesmo critério da referência (49), onde é tratada a biblioteca de dados JAERI - versão 2, considerada também como um jogo em início de evolução; isto é, aplicamos variações de +10%, uniforme a todos os isótopos, reações e aos diversos grupos de energia. Acreditamos ainda ser este um procedimento razoável, tendo em vista a natureza do nosso trabalho.

TABELA III.4 - FATORES DE AJUSTAMENTO OBTIDOS POR BARRÉ PARA O JOGO CADARACHE - VERSÃO 2.

REAÇÃO	LIMITES DE ENERGIA	VARIÇÕES DAS SEÇÕES DE CHOQUE EM %			
		U-235	Pu-239	U-238	Fe
CAPTURA	0,821 - 14,5 MeV	- 24,0	- 70,0	- 5,2	
	0,111 - 0,821 MeV	+ 17,0	+ 45,0	- 14,2	
	9,12 - 111 KeV	+ 6,5	+ 2,0	- 11,2	+ 5,0
	0,275 - 9,12 KeV	- 8,0	+ 50,0	+ 6,0	+ 200,0
FISSÃO	0,821 - 14,5 MeV	+ 6,0	- 5,0	- 7,5	
	0,111 - 0,821 MeV	- 4,0	+ 5,0		
	9,12 - 111 KeV	- 6,0	- 14,0		
	0,275 - 9,12 KeV	+ 2,0	+ 10,0		
ν	0,821 - 14,5 MeV	- 0,5	- 1,5	+ 0,4	
	0,111 - 0,821 MeV	- 2,9	+ 0,6		
	9,12 - 111 KeV	- 0,4	- 2,0		
	0,275 - 9,12 KeV	- 2,0	+ 1,0		
TRANSPORTE	0,821 - 14,5 MeV			+ 6,0	- 10,0
	0,111 - 0,821 MeV			- 3,8	- 10,0
	9,12 - 111 KeV			- 7,0	- 10,0
ESPALHAMENTO INELÁSTICO					
(I → II)				- 30,0	+ 15,0
(I → III)				- 25,0	
(II → III)				- 15,0	

CAPÍTULO IV

PARALELO ENTRE OS SISTEMAS DE CÁLCULO

IV.1 - Sensibilidades dos Parâmetros Integrais

Com a finalidade de estabelecer uma comparação entre os valores obtidos com os sistemas de cálculo mostrados nas figuras (III.3) e (III.4), utilizou-se a montagem crítica ZPR-3-48, devido às razões expostas na seção III.2.

As sensibilidades consideradas para estabelecer este paralelo correspondem às estimativas de sensibilidades integrais dos diversos parâmetros selecionados. Portanto uma variação uniforme de +10% foi aplicada às seções de choque de captura e fissão do U-238 e Pu-239, para todos os grupos de energia simultaneamente.

Os resultados obtidos destes cálculos propiciaram-nos ainda a identificação de quais seções de choque possuem influência mais preponderante sobre os parâmetros considerados.

IV.1.1 - Sensibilidades das Razões de Taxas de Reações

A tabela (IV.1) inclui os resultados obtidos para os quatro tipos de razões de taxas de reações centrais conside-

TABELA IV.1 - SENSIBILIDADES DE RAZÕES DE TAXAS DE REAÇÕES CENTRAIS, DEVIDO À ALTERAÇÕES NAS SEÇÕES DE CHOQUE DISCRIMINADAS, NO ZPR-3-48.

PARÂMETRO INTEGRAL	VARIÇÕES CONSIDERADAS	SENSIBILIDADES DE R $\left(\frac{\Delta R}{R} / \frac{\Delta \sigma}{\sigma}\right)$			
		MÉTODO DIRETO (MUDE)	TEORIA DA PERTURBAÇÃO VARIACIONAL		
			EFEITO DIRETO	EFEITO ESPECTRAL	ESTIMATIVA VARIACIONAL (SOMA)
$\sigma_{f8/\sigma_{f5}}$ (CENTRAL)	+10% σ_{f8}	0,9556	1,0000	-0,0448	0,9552
	+10% σ_{c8}	0,2649	0,0000	0,2680	0,2680
	+10% σ_{f9}	0,3120	0,0000	0,3133	0,3133
	+10% σ_{c9}	0,1064	0,0000	0,1077	0,1077
$\sigma_{c8/\sigma_{f5}}$ (CENTRAL)	+10% σ_{f8}	0,0044	0,0000	0,0045	0,0045
	+10% σ_{c8}	0,9576	1,0000	-0,0442	0,9578
	+10% σ_{f9}	-0,0367	0,0000	-0,0359	-0,0359
	+10% σ_{c9}	-0,0042	0,0000	-0,0037	-0,0037
$\sigma_{f9/\sigma_{f5}}$ (CENTRAL)	+10% σ_{f8}	-0,0038	0,0000	-0,0038	-0,0038
	+10% σ_{c8}	0,0590	0,0000	0,0598	0,0598
	+10% σ_{f9}	1,0661	1,0000	0,0666	1,0666
	+10% σ_{c9}	0,0247	0,0000	0,0249	0,0249
$\sigma_{c9/\sigma_{f5}}$ (CENTRAL)	+10% σ_{f8}	0,0087	0,0000	0,0089	0,0089
	+10% σ_{c8}	-0,1955	0,0000	-0,2002	-0,2002
	+10% σ_{f9}	-0,1966	0,0000	-0,2014	-0,2014
	+10% σ_{c9}	0,8758	1,0000	-0,1269	0,8731

radas.

Para este tipo de parâmetro integral as sensibilidades de maior valor absoluto ocorrem para as seções de choque que participam do parâmetro em referência. Afora isto, observamos que as sensibilidades mais notórias são aquelas referentes à seção de choque de fissão do Pu-239 e à seção de choque de captura do U-238. Tal fato pode ser explicado pela importância da captura e fissão destes isótopos no balanço integral, conforme é mostrado na tabela (IV.2).

Observa-se ainda na tabela (IV.1) que o índice espectral σ_{f8}/σ_{f5} mostrou-se mais sensível às variações aplicadas que os demais. A razão disto é que a seção de choque de fissão do U-238 é nula abaixo de 498 KeV^(*) e portanto na faixa de energia abaixo deste valor a influência do fluxo alterado consta apenas na taxa de reação do denominador.

Com relação aos sistemas de cálculo, conforme referido no item III.4.1, os valores obtidos utilizando-se o método direto com o código MUDE⁽¹¹⁾ são considerados suficientemente exatos. Assim sendo foram tomados como valores de referência para as comparações.

A observação dos valores encontrados revela-nos que a estimativa variacional com o código VARI-1D⁽⁹⁾ mostrou-se

(*) - Limiar inferior do 5º grupo de energia da estrutura de grupos do sistema CARNAVAL II.

TABELA IV.2 - DECOMPOSIÇÃO DO BALANÇO INTEGRAL DO NÚCLEO PARA A MONTAGEM CRÍTICA ZPR-3-48^(*)

ISÓTOPO	PRODUÇÃO	CAPTURA	FISSÃO
U-235	0,705	0,083	0,289
U-238	11,845	17,222	4,224
Pu-239	85,002	7,811	28,840
Pu-240	1,493	0,562	0,469
Pu-241	0,950	0,045	0,318
Pu-242	0,005	0,002	0,002
C	-	0,003	-
Na	-	0,132	-
Al	-	0,004	-
Cr	-	0,170	-
Fe	-	0,926	-
Ni	-	0,246	-
Mo	-	0,267	-
Mn	-	0,057	-
Si	-	0,004	-
TOTAL	100,000	27,534	34,142

RESUMO

PRODUÇÃO = 100,000

CAPTURA = 27,534

FISSÃO = 34,142

FUGA = 38,324

(*) - As taxas de produção, captura e fissão estão normalizadas para a produção total igual a 100.

bastante acurada, sendo que os valores, de um modo geral, apresentaram-se um valor absoluto ligeiramente superiores à estimativa de referência.

IV.1.2 - Sensibilidades do K_{eff}

Na tabela (IV.3) são mostrados os valores das sensibilidades integrais do k_{eff} . A estimativa variacional apresentada corresponde aos valores obtidos com a aproximação de primeira ordem da teoria da perturbação clássica, calculada pelo código VARI-1D, a qual tem sido considerada suficientemente acurada para este tipo de parâmetro⁽⁹⁾.

Observamos que o k_{eff} é razoavelmente sensível a todas as seções de choque desta análise, destacando-se as sensibilidades à σ_{f9} e σ_{c8} .

IV.1.3 - Sensibilidades dos Efeitos em Reatividade

Inicialmente os valores destes efeitos foram computados por diversos métodos e aproximações, para os isótopos U-235, U-238 e Pu-239, ao centro da montagem crítica ZPR-3-48.

Uma estimativa exata, neste caso, foi incluída, tendo sido determinada pela diferença da reatividade através de dois

TABELA IV.3 - SENSIBILIDADES DO k_{eff} PARA CÁLCULOS HOMOGÊNEOS, EM GEOMETRIA ESFÉRICA A 1-D, DEVIDO À ALTERAÇÕES NAS SEÇÕES DE CHOQUE DISCRIMINADAS, ZPR-3-48.

PARÂMETRO INTEGRAL	VARIACÕES CONSIDERADAS	SENSIBILIDADES DE $k \left(\frac{\Delta k}{k} / \frac{\Delta \sigma}{\sigma} \right)$	
		MÉTODO DIRETO (MUDE)	ESTIMATIVA VARIACIONAL 1a. ORDEM
k_{eff} (Difusão - 1D)	+ 10% σ_{f8}	0,0885	0,0883
	+ 10% σ_{c8}	-0,1927	-0,2004
	+ 10% σ_{f9}	0,5572	0,5285
	+ 10% σ_{c9}	-0,0666	-0,0681

cálculos com o código MUDE, um sem perturbação e outro com perturbação. Esta estimativa nos propicia um julgamento prévio dos sistemas de cálculo que vem sendo adotados para este tipo especial de parâmetro, fornecendo-nos uma idéia da precisão que a este nível se faz importante, já que nos cálculos subsequentes das sensibilidades teremos uma fonte de erros oriunda de aproximações de duas naturezas, tendo em vista a necessidade de computação de alterações em sistemas perturbados.

A tabela (IV.4) inclui os resultados obtidos para os três efeitos em reatividade considerados.

TABELA IV.4 - COMPARAÇÕES DOS VALORES DOS EFEITOS EM REATIVIDADE AO CENTRO DO ZPR-3-48, EM UNIDADES $(10^{-6} \times \frac{\Delta k}{k}/g)$, COMPUTADOS POR VÁRIOS MÉTODOS E APROXIMAÇÕES.

ISÓTOPO	EXATO	MUDE T.P.C. 1a. ORDEM	ESTIMATIVA VARIACIONAL 1a. ORDEM	ESTIMATIVA VARIACIONAL
U-235	3,644	3,748	3,725	3,722
U-238	-0,244	-0,247	-0,242	-0,242
Pu-239	5,023	5,040	5,009	5,011

Comparando-se os resultados das demais estimativas com aqueles da estimativa exata, observamos que, de um modo geral, elas se equivaleram em precisão. As discrepâncias mais acentuadas ocorreram para os resultados do efeito em reatividade do U-235, que porém não foram significantes.

A seguir foram computadas as sensibilidades destes parâmetros, utilizando-se os sistemas de cálculo previamente de finidos.

Os valores são mostrados na tabela (IV.5). Neste caso, as sensibilidades calculadas com o método direto não são mais estimativas exatas, como nos casos anteriores, porém ainda são suficientemente acuradas pois procede-se por diferença entre dois cálculos de primeira ordem, não se introduzindo portanto novas aproximações em $\Delta\rho$ como as que ocorrem com a estimativa de primeira ordem variacional (ver seção II.3, item II.3.3).

A comparação dos resultados obtidos com a estimativa variacional e com o método direto revela-nos uma concordância bastante razoável, não se verificando nenhuma discrepância comprometedora. O mesmo já não ocorre com os valores da estimativa de primeira ordem variacional, reforçando-se assim o que já havia sido dito acima.

Um exame geral dos resultados desta tabela revela-nos ainda que as sensibilidades mais preponderantes foram obtidas com a σ_{c8} e σ_{f9} .

IV.2 - Sensibilidades do Espectro

O espectro é sensível principalmente às variações das seções de choque de espalhamento elástico do Oxigênio e Sódio e da seção de choque de espalhamento inelástico do U-238⁽⁶⁾. As seções de choque de captura e fissão do U-238 e Pu-239 também

TABELA IV.5 - SENSIBILIDADES DOS EFEITOS EM REATIVIDADE, DEVIDO À ALTERAÇÕES NAS SEÇÕES DE CHOQUE DISCRIMINADAS, NO ZPR-3-48

EFEITO EM REATIV.	VARIÇÕES CONSIDERADAS	SENSIBILIDADES DE $\rho \left(\frac{\Delta \rho}{\rho} / \frac{\Delta \sigma}{\sigma} \right)$				
		MÉTODO DIRETO (1a. ORDEM)	TEORIA DA PERTURBAÇÃO VARIACIONAL			
			EFEITO DIRETO (1a. ORDEM)	EFEITO ESPECTRAL		ESTIMATIVA VARIACIONAL (SOMA)
				PROVENIENTE DE ϕ	PROVENIENTE DE ϕ^*	
ρ_5	+ 10% σ_{f8}	-0,3049	-0,3150	-0,0185	0,0238	-0,3097
	+ 10% σ_{c8}	0,5415	0,3943	0,0129	0,1519	0,5591
	+ 10% σ_{f9}	-1,7734	-1,7191	-0,0438	-0,0100	-1,7729
	+ 10% σ_{c9}	0,1983	0,1340	-0,0340	0,1060	0,2060
ρ_8	+ 10% σ_{f8}	-0,6487	-0,7059	0,0065	0,0344	-0,6650
	+ 10% σ_{c8}	1,0893	1,2098	-0,2304	0,1279	1,1073
	+ 10% σ_{f9}	-0,5565	-0,2297	-0,2851	-0,0700	-0,5848
	+ 10% σ_{c9}	-0,2419	-0,0729	-0,1156	-0,0645	-0,2530
ρ_9	+ 10% σ_{f8}	-0,3030	-0,2899	-0,0234	0,0056	-0,3077
	+ 10% σ_{c8}	0,5379	0,3370	0,0956	0,1215	0,5541
	+ 10% σ_{f9}	-0,5734	-0,5952	0,0231	0,0013	-0,5708
	+ 10% σ_{c9}	0,0365	-0,0316	0,0020	0,0654	0,0358

exercem sobre ele alguma influência, razão pela qual esta análise é aqui incluída.

Para a determinação das sensibilidades do espectro de fluxo direto e adjunto, uma variação uniforme de +10% foi aplicada às seções de choque de captura e fissão do U-238 e Pu-239, para todos os grupos de energia simultaneamente. Os cálculos foram realizados com o código MUDE.

Nas figuras (IV.1) à (IV.4) podemos observar a variação percentual do espectro de fluxo direto às variações consideradas. O exame destes gráficos e das tabelas (IV.1) e (IV.5) revela-nos que para uma variação de +10% nas seções de choque, os parâmetros integrais analisados variaram relativamente pouco (*). No entanto, variações de maior amplitude podem ser observadas no espectro, como as que ocorrem em decorrência de variações na seção de choque de fissão do Pu-239, chegando-se, neste caso, quase a valores de -30%. A influência destas variações sobre os parâmetros integrais porém é reduzida, sendo os efeitos espectrais $\left(\frac{\Delta R}{R}\right)_\phi$ menores que 0,7% para as razões de taxas de reações centrais σ_{c8}/σ_{f5} e σ_{f9}/σ_{f5} e não ultrapassando o valor de 3,1% para a σ_{f8}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5} . Para os efeitos em reatividade, estes efeitos, devido ao fluxo direto, apresentam-se menores que 3%.

(*) - Os valores das tabelas devem ser considerados multiplicados por 10 para observarmos o percentual de variação dos parâmetros.

Devido ao exposto, quando se dispõe de informações bem precisas sobre o espectro medido, é de todo válido utilizá-las para o ajuste das seções de choque cujas variações exerçam uma influência razoável sobre o espectro.

Nas figuras (IV.5) à (IV.8) são mostradas as variações percentuais do espectro de fluxo central adjunto às variações consideradas.

Observa-se que os valores são sensivelmente menores que aqueles encontrados para o fluxo direto.

Um fato interessante observado foi a mudança de sinal que ocorreu do grupo 3 para o grupo 4, com exceção do gráfico para a seção de choque de captura do Pu-239, onde esta mudança se deu do grupo 10 para o grupo 11.

Um outro aspecto que se destaca é que os máximos percentuais de variações de um grupo para outro ocorreram para os grupos mais baixos de energia, com exceção do gráfico para a σ_{f8} , fato perfeitamente explicado devido à existência de fissão do U-238 somente à altas energias. Este efeito acima referido se deve ao comportamento do fluxo adjunto para estes grupos de energia (ver apêndice F).

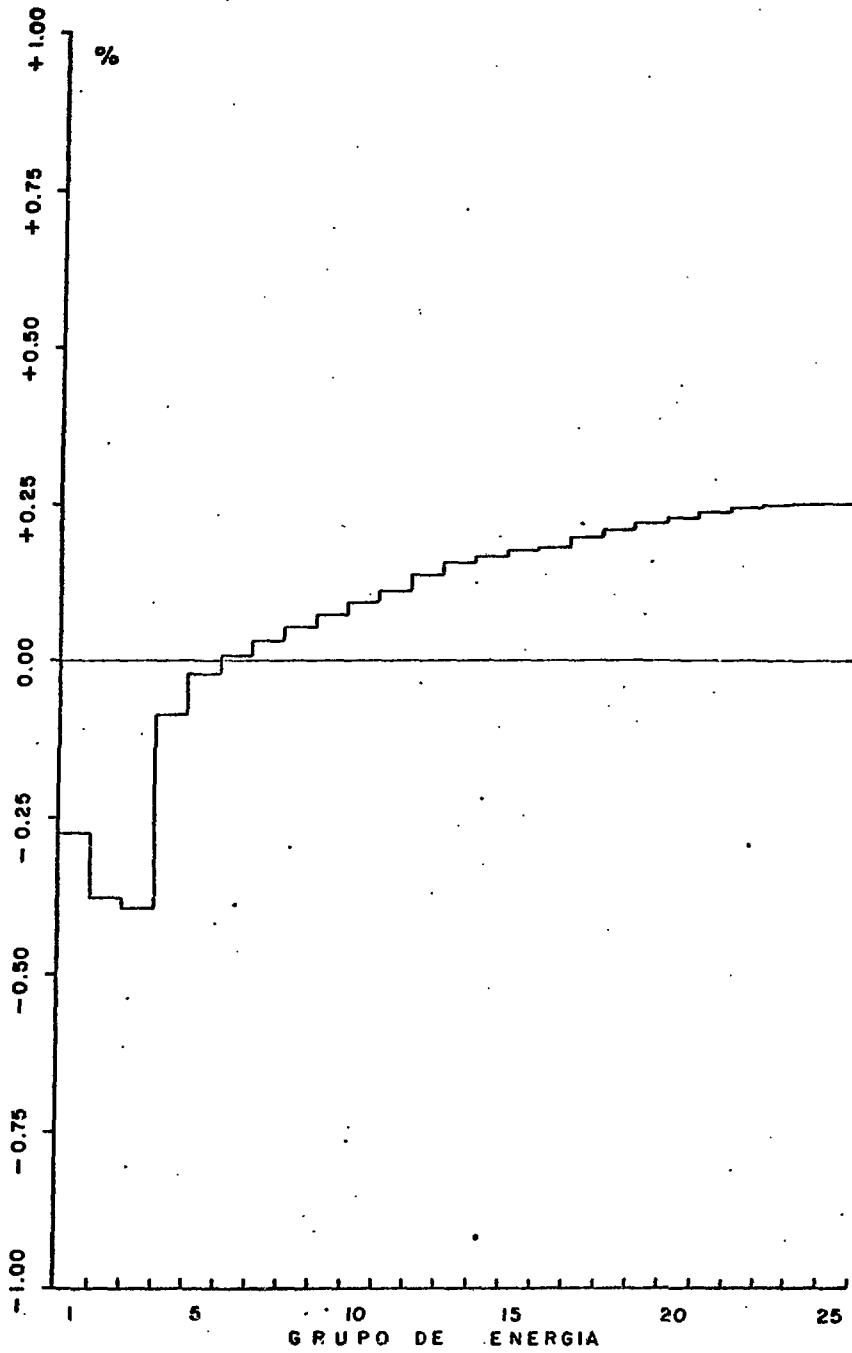


FIG. IV.1 - VARIAÇÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL DIRETO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIAÇÃO GLOBAL DE +10% na σ_{f8}

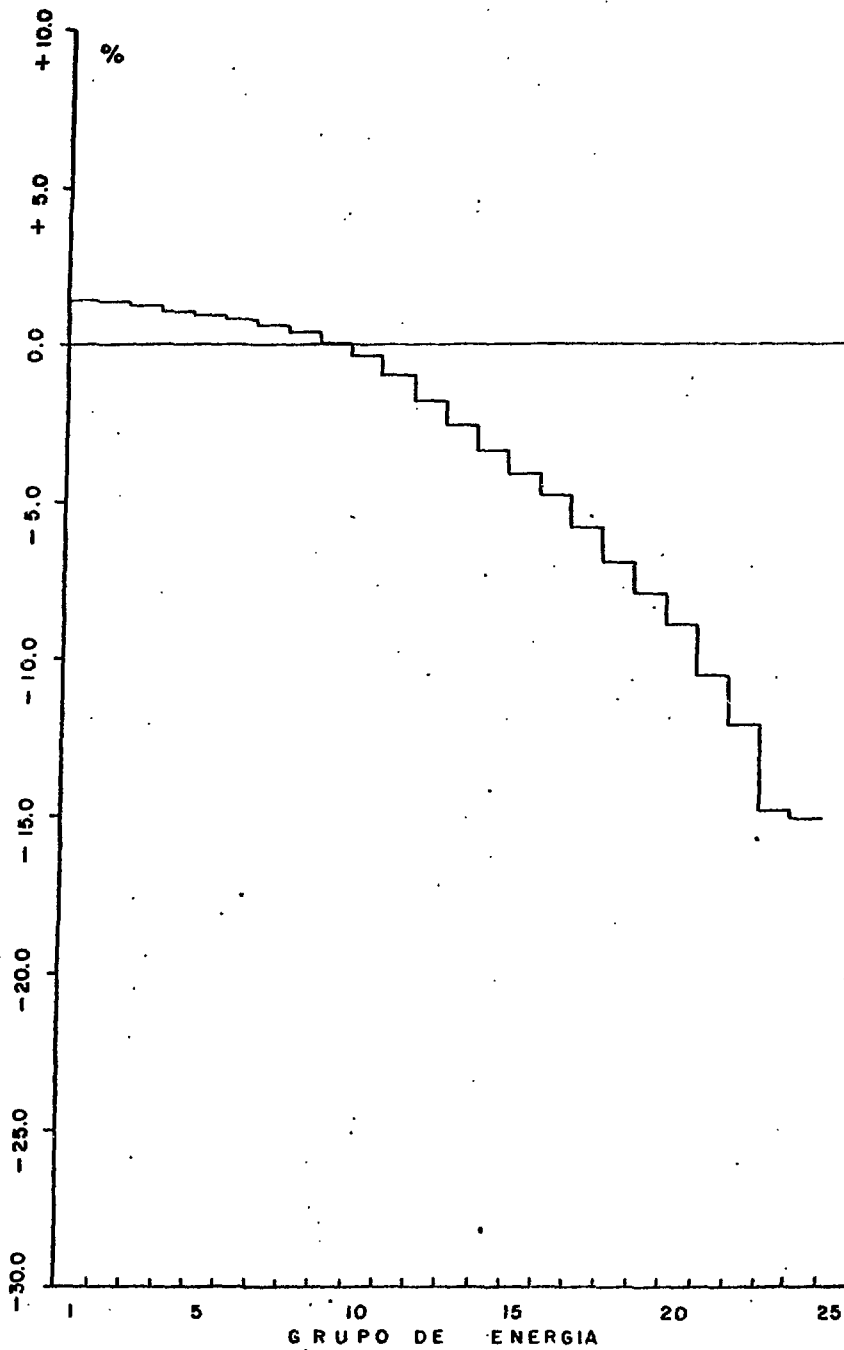


FIG. IV.2 - VARIAÇÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL DIRETO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIAÇÃO GLOBAL DE +10% na σ_{c8}

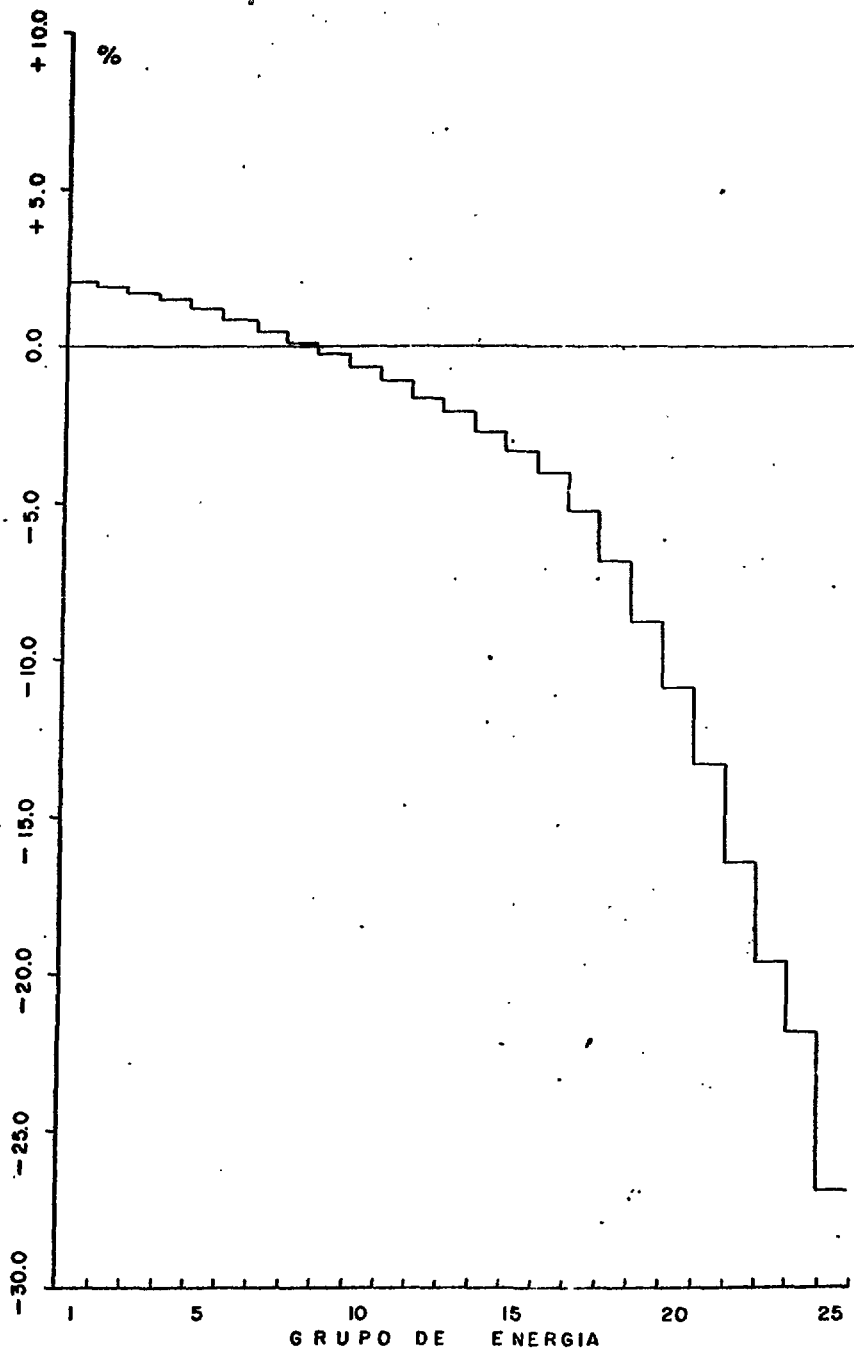


FIG. IV.3 - VARIAÇÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL DIRETO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIAÇÃO GLOBAL DE +10% na σ_{f9}

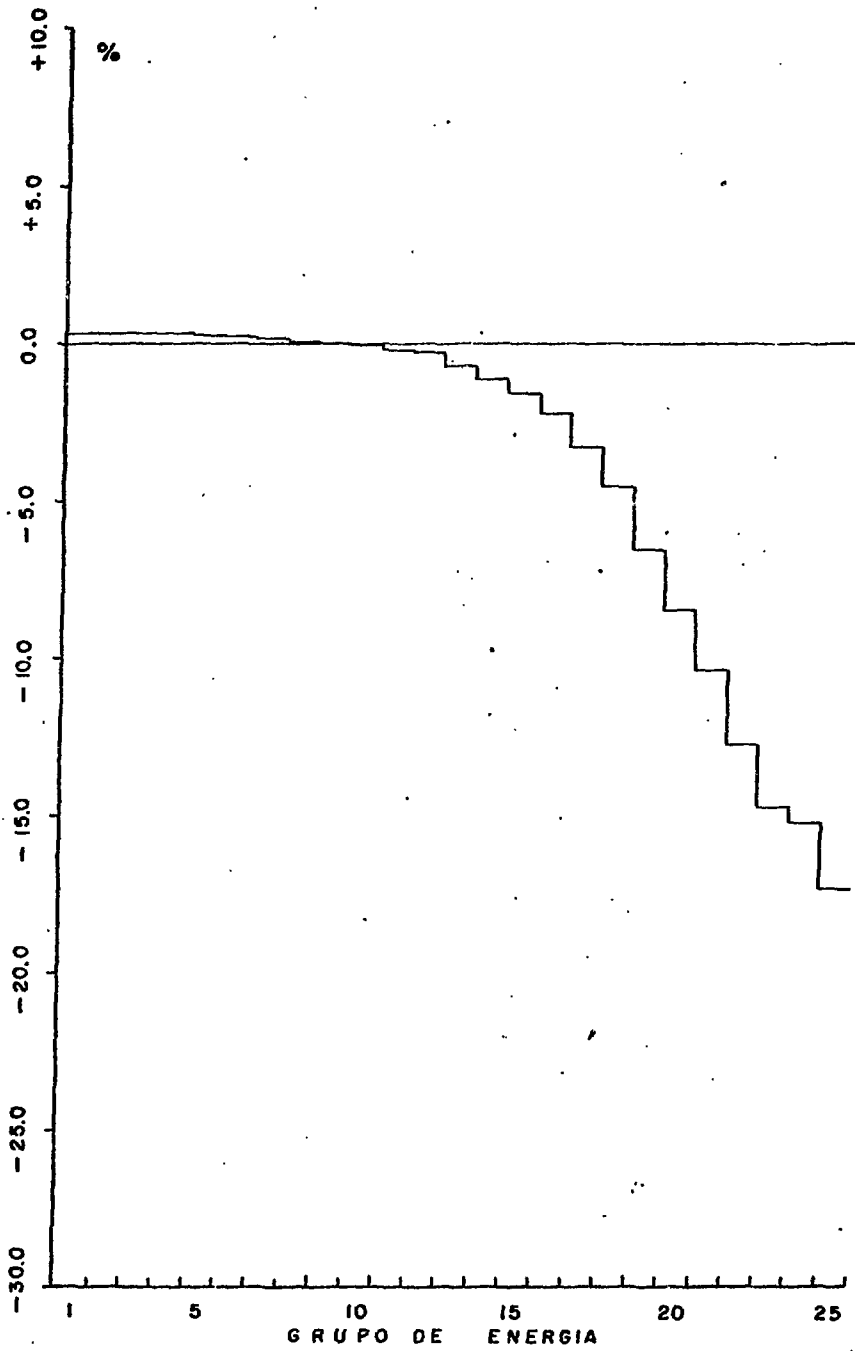


FIG. IV.4 - VARIAÇÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL DIRETO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIAÇÃO GLOBAL DE +10% na σ_{c9}

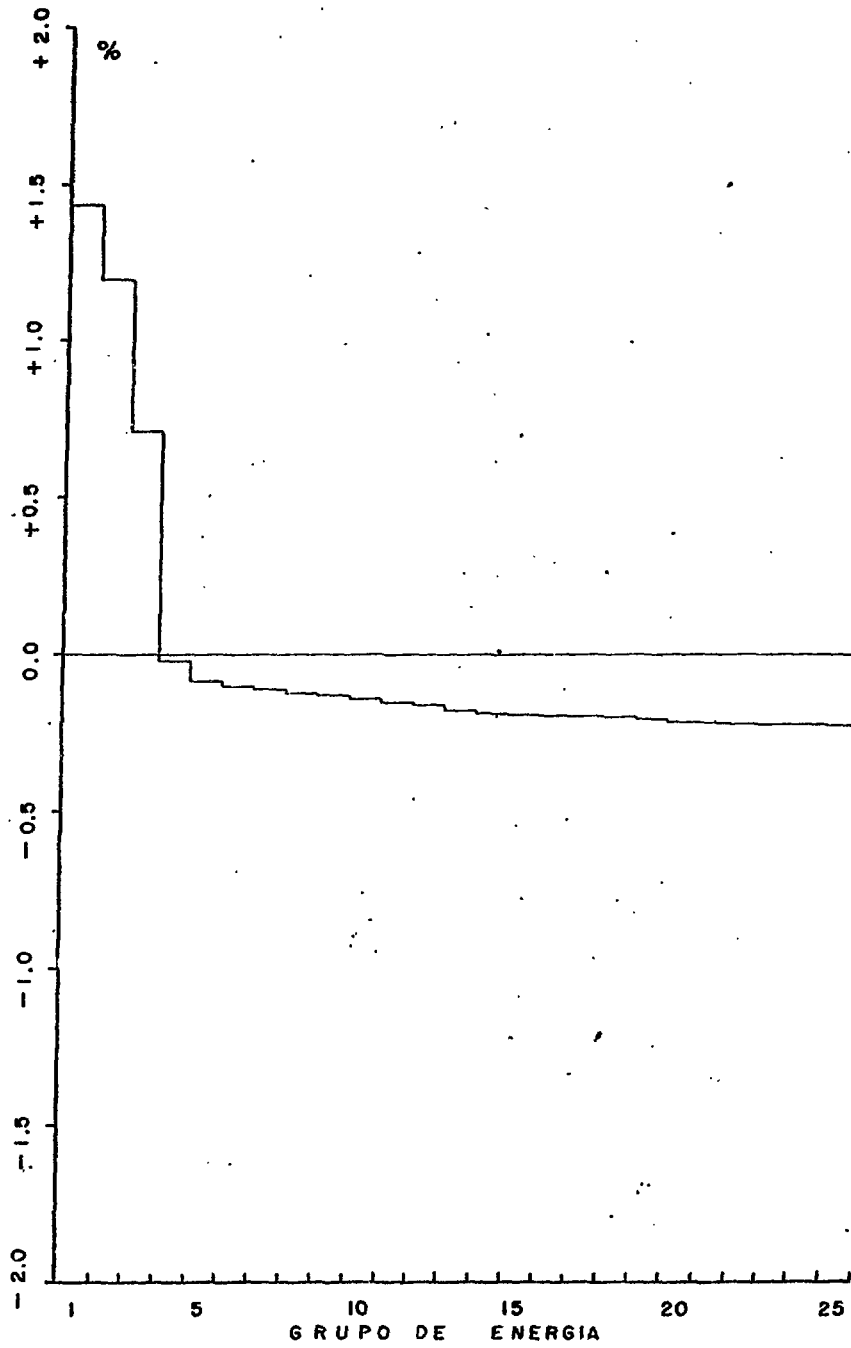


FIG. IV.5 - VARIAÇÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL ADJUNTO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIAÇÃO GLOBAL DE +10% NA σ_{f8}

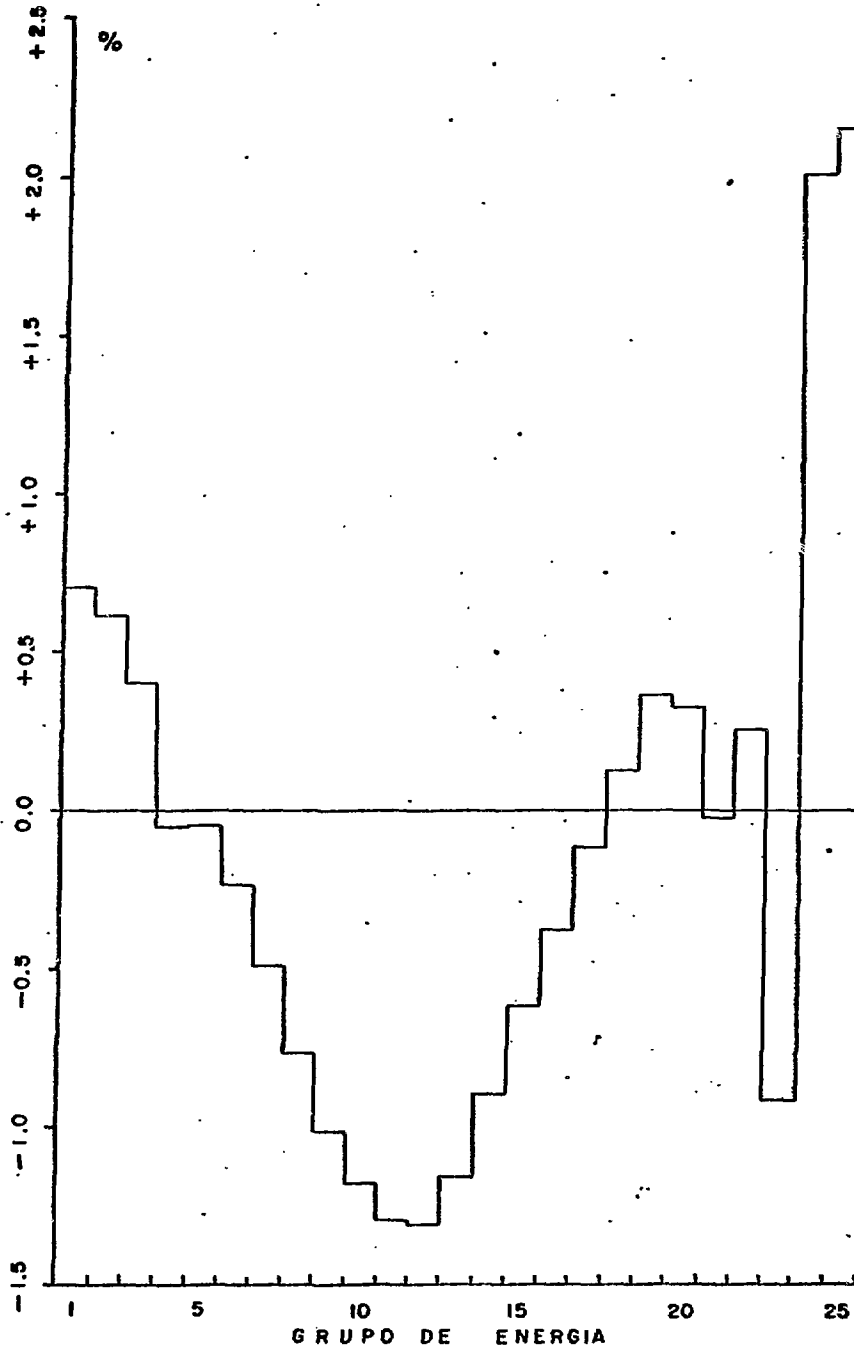


FIG. IV.6 - VARIACÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL ADJUNTO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIACÃO GLOBAL DE +10% NA σ_{c8}

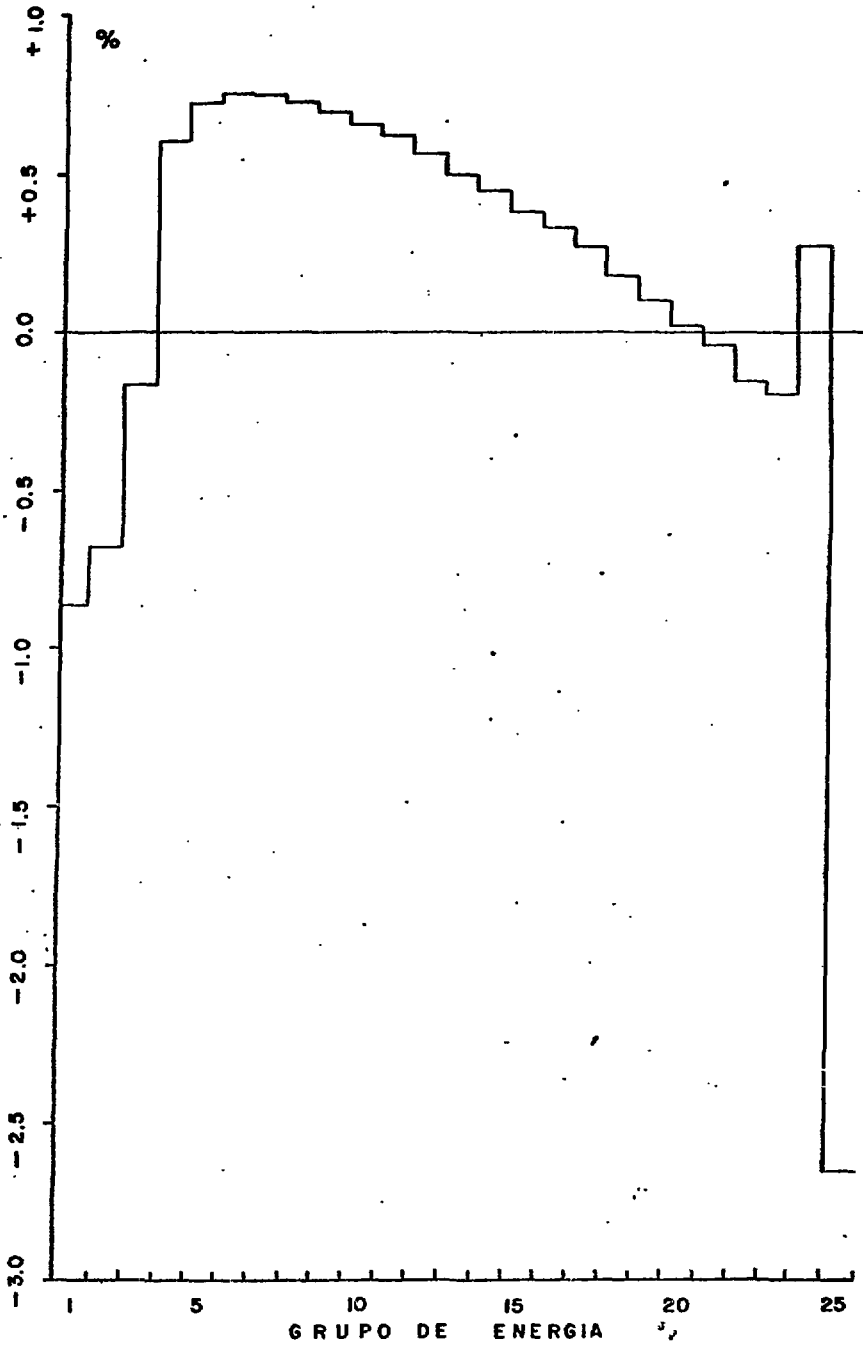


FIG. IV.7 - VARIÇÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL ADJUNTO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIÇÃO GLOBAL DE +10% NA σ_{f9}

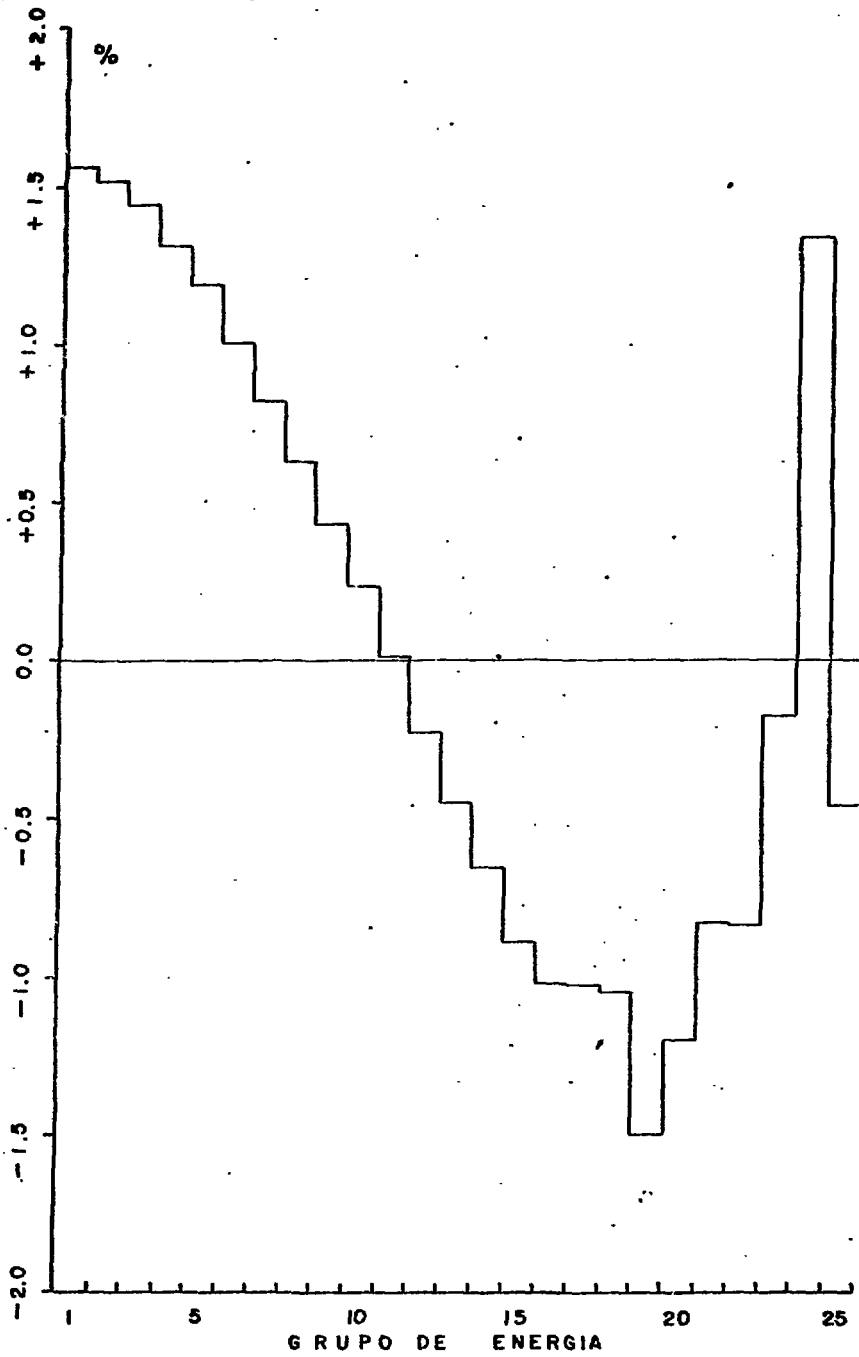


FIG. IV.8 - VARIAÇÃO PERCENTUAL DO FLUXO CENTRAL ADJUNTO, NO ZPR-3-48, DECORRENTE DE UMA VARIAÇÃO GLOBAL DE + 10% NA σ_{c9}

CAPÍTULO V

ESTUDO DA REDUÇÃO DO NÚMERO DE GRUPOS DE ENERGIA

V.1 - Considerações Iniciais

Conforme temos visto na seção I.1, um grande esforço computacional é necessário ser dispendido para a obtenção dos coeficientes de sensibilidade. Uma redução do número de grupos de energia envolvidos em uma análise desta natureza merece neste caso uma atenção especial.

O desequilíbrio existente entre o limitado número de valores de parâmetros integrais medidos e conhecidos e o grande número de seções de choque multigrupo a serem ajustadas estatisticamente é também um fato que nos induz a tomar esta direção. Este assunto porém será tratado mais especificamente no próximo capítulo.

Uma opção seria a redução do jogo de seções de choque de 25 grupos em poucos macrogrupos, e a partir daí todos os cálculos seriam realizados nesta nova estrutura de grupos. Isto porém acarretaria uma perda de informações que poderiam comprometer os cálculos subsequentes.

Neste trabalho preferimos realizar os cálculos neutrônicos a 25 grupos, conforme autores das referências (8) e (50), e pensar em uma redução ao nível dos cálculos de sensibi-

lidade. Assim sendo, o reagrupamento que estamos aqui pretendendo refere-se à aplicação de variações em 2 ou mais grupos vizinhos simultaneamente, e em várias posições da faixa de energia. Com isto passaríamos a considerar as sensibilidades integrais nestes casos.

Para este estudo utilizou-se a montagem crítica ZPR-3-48, que possui um espectro intermediário dentro da faixa coberta pelas três montagens críticas selecionadas, buscando-se uma solução que fosse válida para as demais.

V.2 - Sensibilidades das Razões de Taxas de Reações, do K_{eff} e do Efeito em Reatividade do U-235, por Grupo de Energia

Com a finalidade de estabelecermos um conjunto de valores de base para os estudos a serem desenvolvidos, foram calculados inicialmente os coeficientes de sensibilidade por grupo de energia das razões de taxas de reações centrais σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5} , para variações nas seções de choque que fazem parte integrante destes parâmetros, ou seja:

$$\alpha_{\frac{\sigma_{f8}/\sigma_{f5}}{\sigma_{f8}}}, \quad \alpha_{\frac{\sigma_{c8}/\sigma_{f5}}{\sigma_{c8}}}, \quad \alpha_{\frac{\sigma_{f9}/\sigma_{f5}}{\sigma_{f9}}} \quad \text{e} \quad \alpha_{\frac{\sigma_{c9}/\sigma_{f5}}{\sigma_{c9}}}$$

Como já temos visto na tabela (IV.1), estas sensibilidades apresentam valores preponderantes em relação às demais e com elas temos condições de analisar os efeitos direto e espectral envolvidos nas estimativas.

Os coeficientes de sensibilidade do k_{eff} e do efeito em reatividade do U-235 para estas quatro seções de choque foram também computados.

Para este estudo calculou-se inicialmente as sensibilidades dos 19 primeiros grupos, sendo que os grupos do 20º ao 25º foram tomados juntamente, sendo computados para eles as sensibilidades integrais, tendo-se em conta que estes grupos de energia possuem uma faixa de incerteza bem reduzida, não sendo pois considerados nos ajustes estatísticos de seções de choque do jogo CADARACHE⁽⁸⁾.

Os perfis de sensibilidade referentes a estes casos podem ser vistos nas figuras (V.1) à (V.6), aonde é mostrada também a natureza do efeito espectral (se positivo ou negativo).

V.3 - Estruturação e Análise dos Reagrupamentos

O critério utilizado para verificar a qualidade dos reagrupamentos consistiu em se comparar os valores das sensibilidades integrais e sensibilidades totais, referentes às faixas reagrupadas.

Consideramos como sensibilidade total (α_T), referente a um certo número de grupos de uma faixa de energia, a soma algébrica dos coeficientes de sensibilidade dos grupos considerados. A sensibilidade integral (α_I), referente a um certo número de grupos, como já temos visto, é a sensibilidade obtida quando uma variação é simultaneamente aplicada a estes grupos.

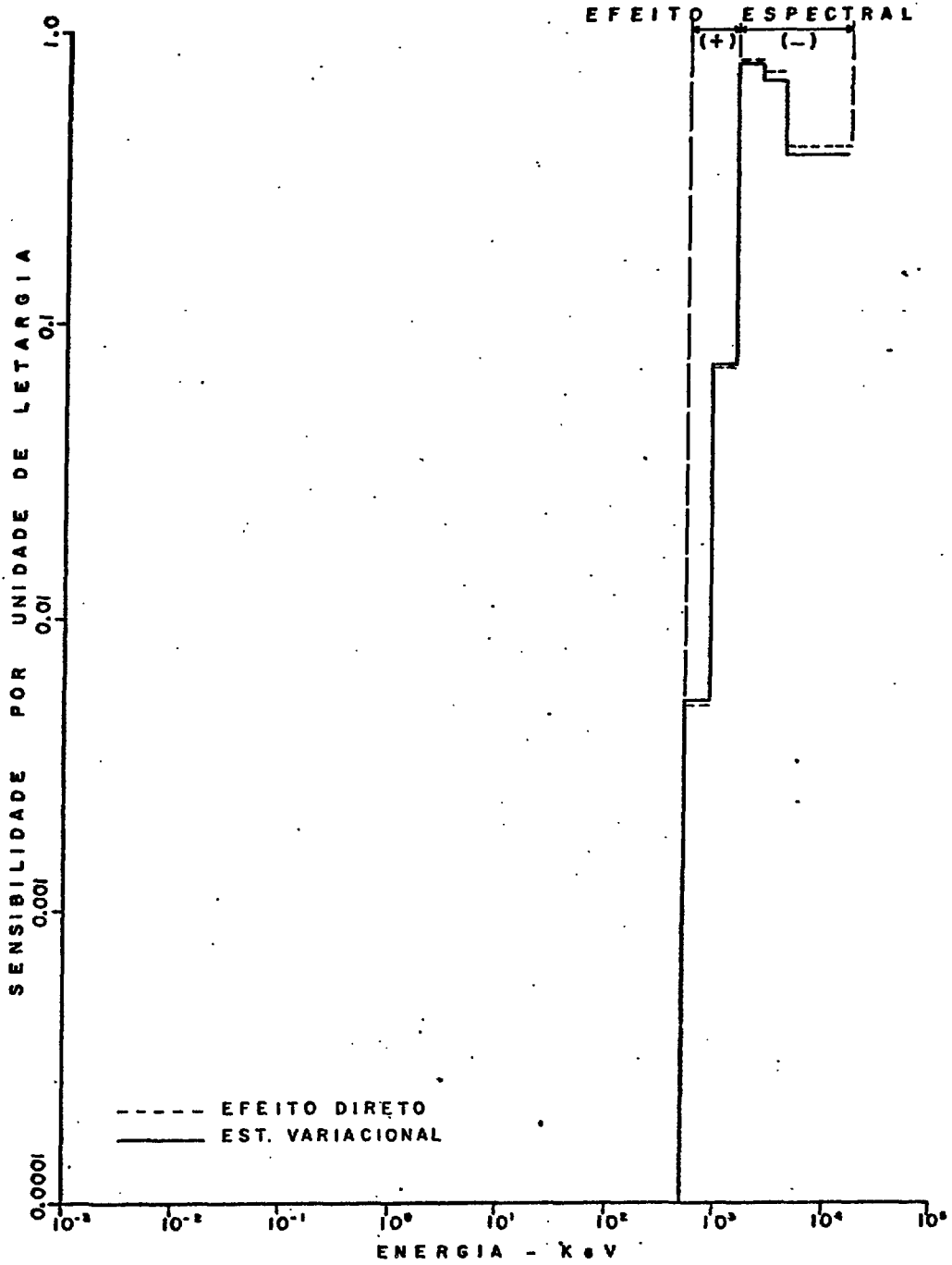


FIG. V.1 - SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{f8}/σ_{f5} PARA A σ_{f8} , NO ZPR-3-48

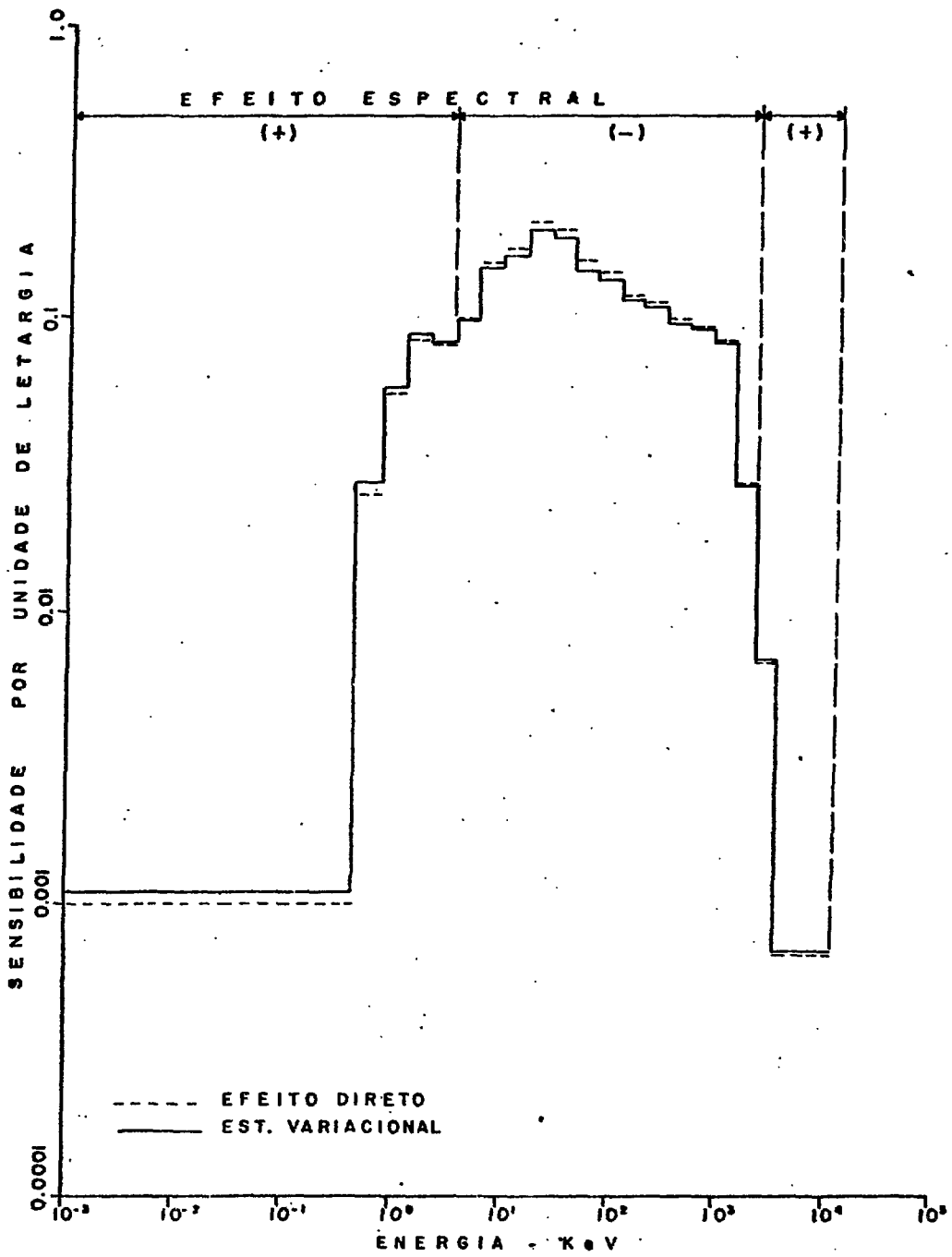


FIG. V.2 - SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{c8}/σ_{f5} PARA A σ_{c8} , NO ZPR-3-48

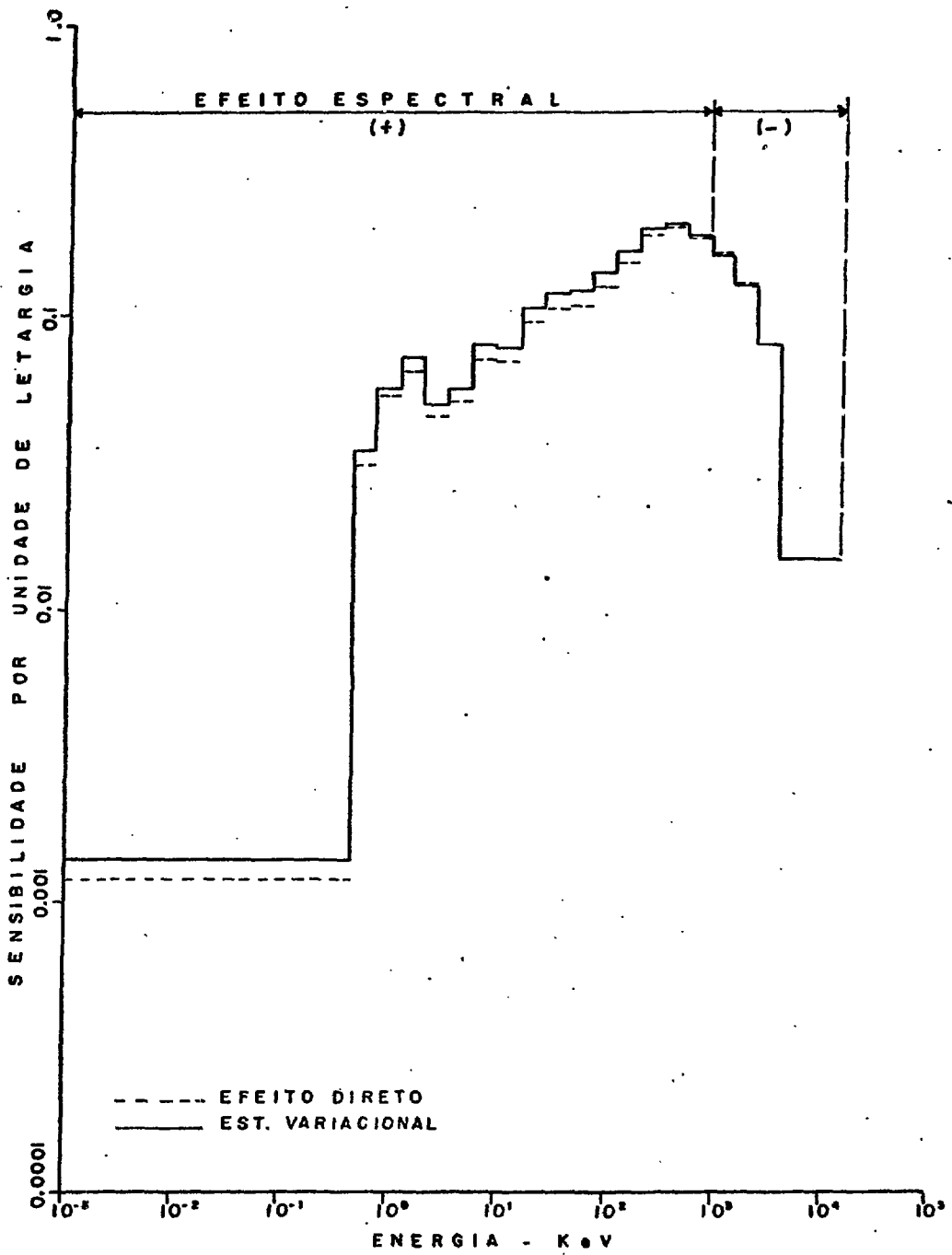


FIG. V.3 - SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{f9}/σ_{f5} PARA A σ_{f9} , NO ZPR-3-48

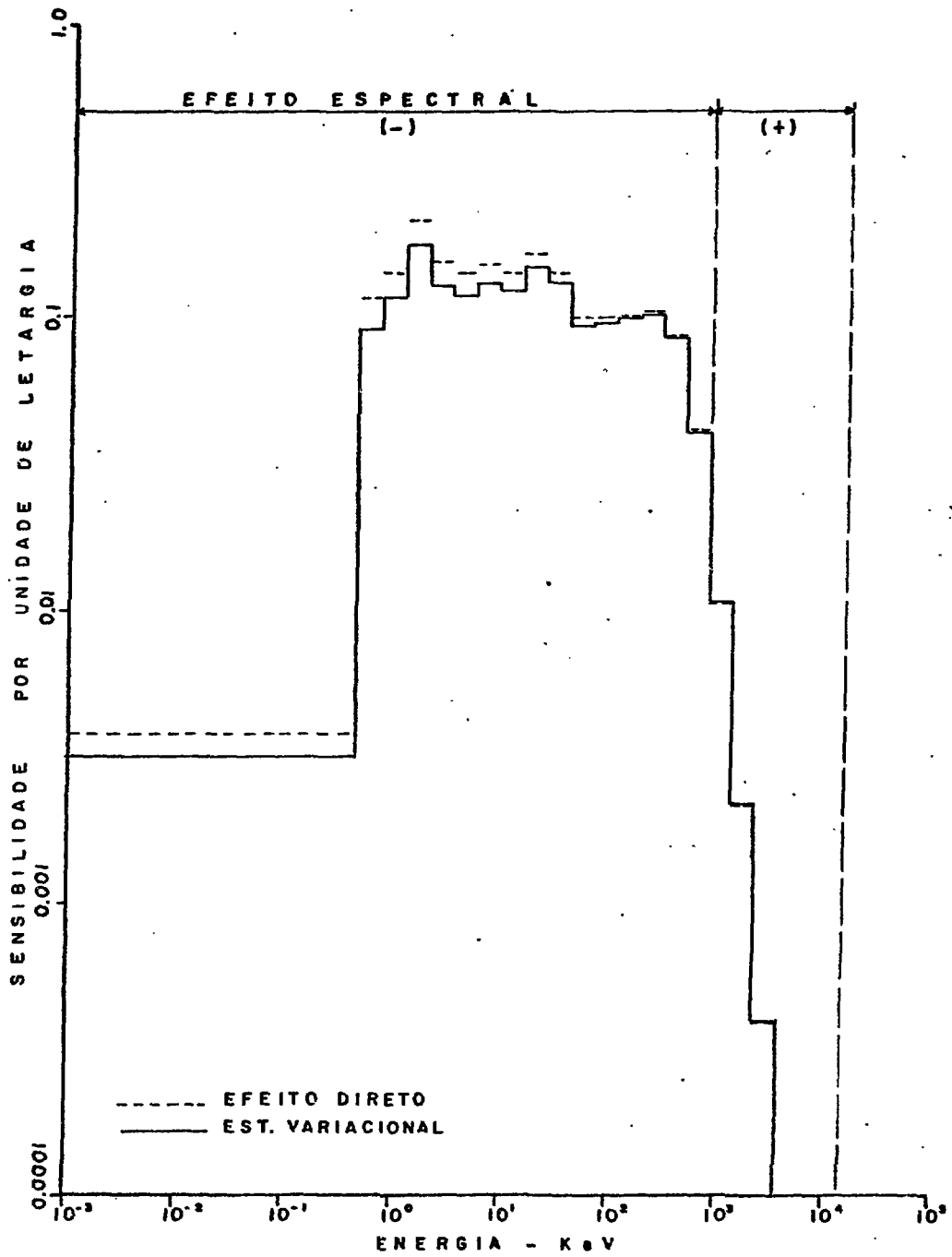


FIG. V.4 - SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{c9}/σ_{f5} PARA σ_{c9} , NO ZPR-3-48

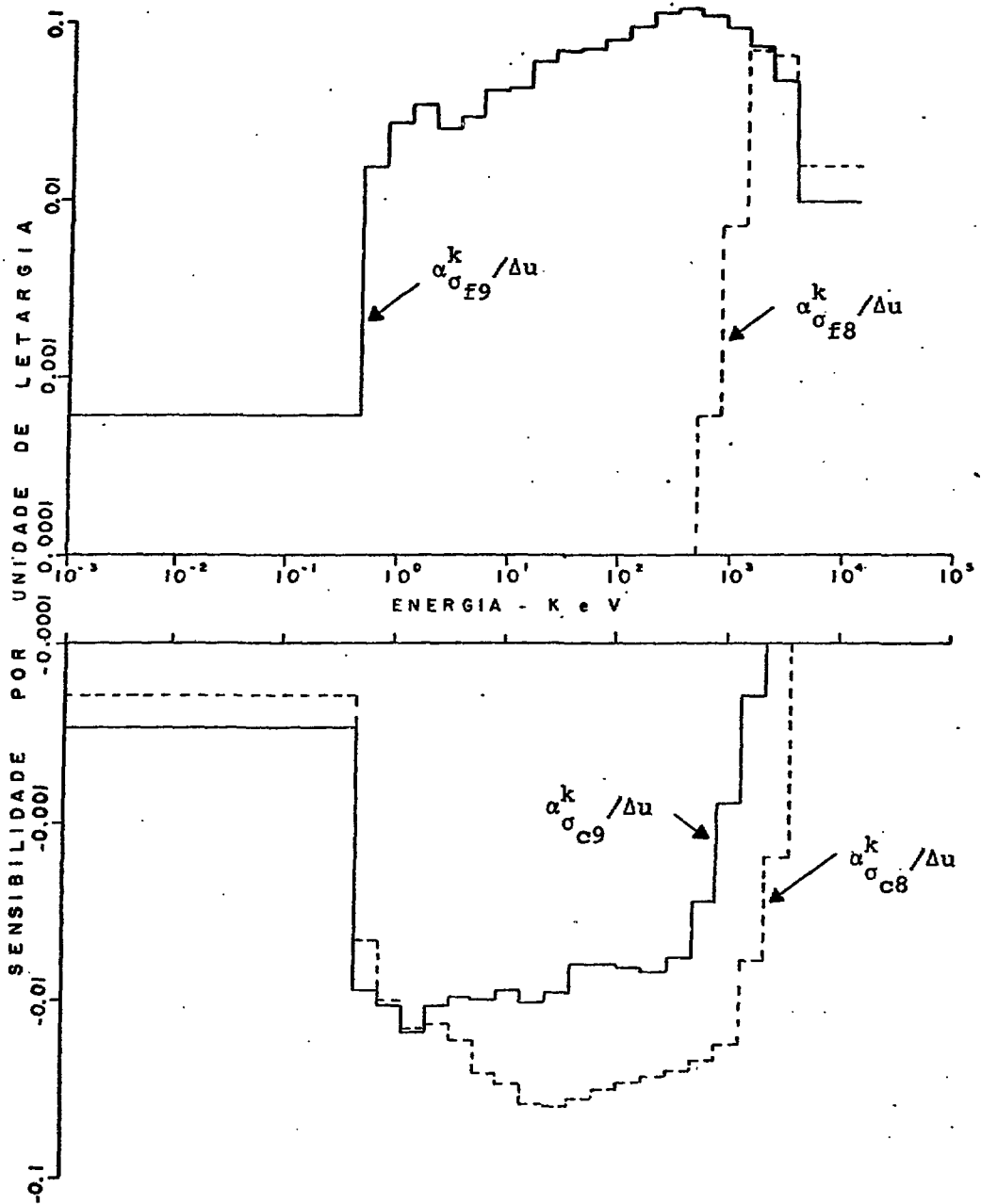


FIG. V.5 - SENSIBILIDADES DO k_{eff} PARA A σ_{f8} , σ_{c8} , σ_{f9} e σ_{c9} , NO ZPR-3-48

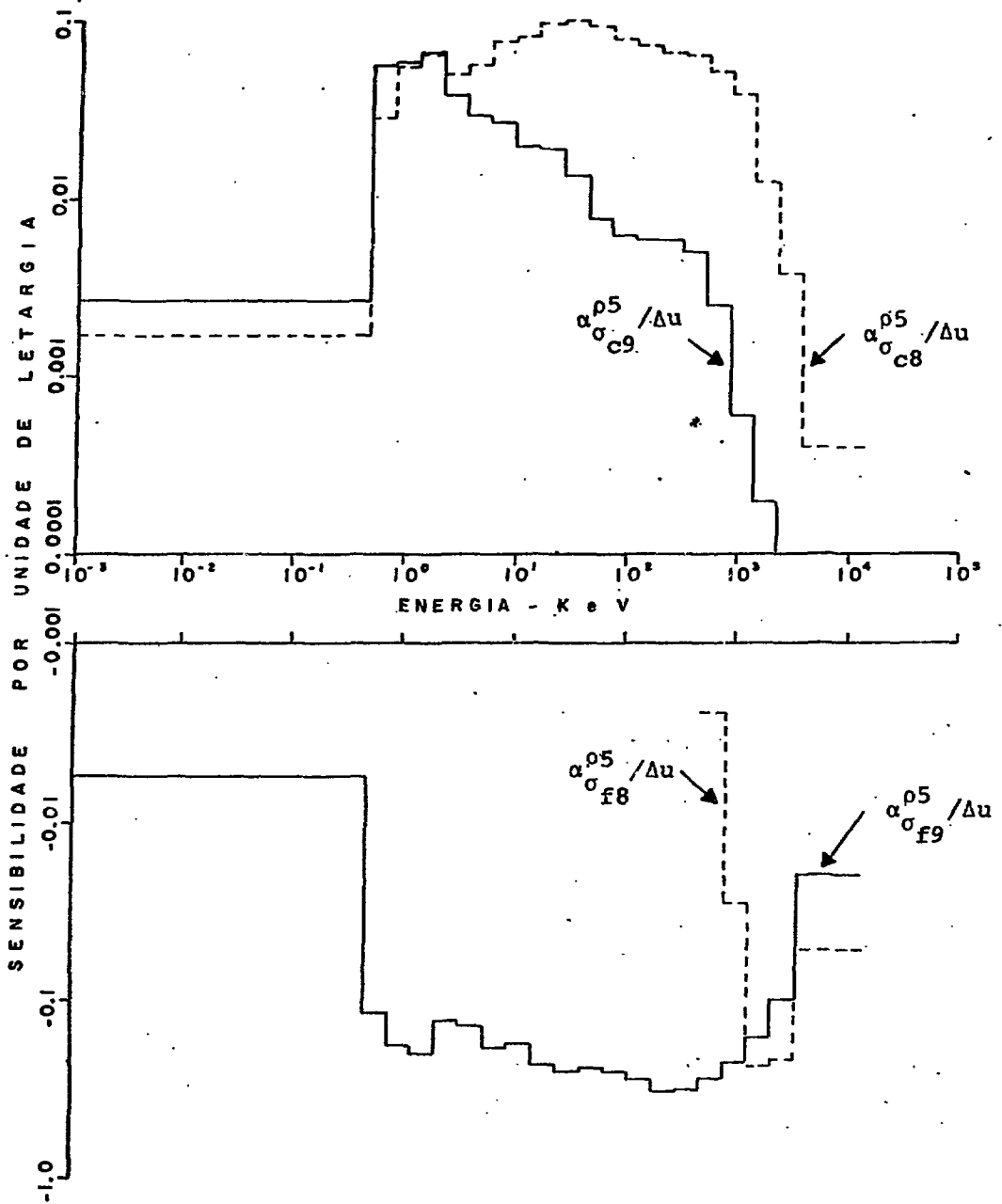


FIG. V.6 - SENSIBILIDADES DO EFEITO EM REATIVIDADE DO U-235 (ρ_5) PARA A σ_{f8} , σ_{c8} , σ_{f9} e σ_{c9} , NO ZPR-3-48

A diferença existente entre α_T e α_I , para uma da faixa de energia, advém da superposição de certos efeitos, provocados pelas variações nas seções de choque, que mascaram as informações sobre as sensibilidades dos grupos constituintes da faixa de energia considerada, quando computamos a sensibilidade integral. Quando, no entanto, calculamos a sensibilidade total, reunimos as informações individuais provenientes de cada grupo, não havendo portanto a introdução de erros provenientes da superposição dos efeitos acima referidos, e que geralmente são de natureza subtrativa. Desta forma, para a verificação da qualidade dos reagrupamentos efetuados, consideramos como valores de referência aqueles obtidos com o critério de sensibilidade total.

O fenômeno acima referido pode ser observado na tabela (V.1), onde são comparados os valores de α_T e α_I para os casos de sensibilidade de razões de taxas de reações centrais analisados nesta fase, e também para o k_{eff} . A faixa de energia considerada compreendeu os 19 primeiros grupos de energia.

Observamos que as diferenças entre os dois cálculos são maiores para os índices espectrais do que para o k_{eff} , porém estas diferenças, de um modo geral, não são grandes, com exceção do caso de α_{f9}^k .

A fim de racionalizar o estudo dos reagrupamentos, definimos nossos objetivos como a busca de uma solução que conciliasse as necessidades das diversas estimativas de sensibilidade.

TABELA V.1 - SENSIBILIDADES TOTAIS E INTEGRAIS PARA A FAIXA DE ENERGIA DO 1º AO 19º GRUPO

PARÂMETRO INTEGRAL	SEÇÕES DE CHOQUE VARIADAS	α_T	α_I	DESVIO ABSOLUTO ($\alpha_I - \alpha_T$)
σ_{f8}/σ_{f5}	σ_{f8}	0,9578	0,9552	- 0,0026
σ_{c8}/σ_{f5}	σ_{c8}	0,9506	0,9470	- 0,0036
σ_{f9}/σ_{f5}	σ_{f9}	1,0478	1,0531	0,0053
σ_{c9}/σ_{f5}	σ_{c9}	0,8527	0,8431	- 0,0096
k_{eff}	σ_{f8}	0,0890	0,0883	- 0,0007
	σ_{c8}	- 0,1984	- 0,1986	- 0,0002
	σ_{f9}	0,5633	0,5238	- 0,0395
	σ_{c9}	- 0,0654	- 0,0652	0,0002

Devido à natureza complexa das sensibilidades dos efeitos em reatividade, envolvendo efeitos espectrais de duas espécies, resolvemos analisar nesta primeira fase apenas as razões de taxas de reações e o k_{eff} .

Como primeiro passo, analisou-se na figura (V.7) a natureza do efeito espectral (se positivo ou negativo), referente aos coeficientes de sensibilidade calculados por grupo de energia e apresentados nas figuras (V.1) à (V.4).

Conforme observamos na figura (V.7), pensando-se inicialmente em reagrupar os grupos de energia, devido ao sinal

CONVENÇÃO :  EFEITO ESPECTRAL(+)
 EFEITO ESPECTRAL(-)

FAIXAS PARA OS REAGRUPAMENTOS, CONFORME SINAL DOS EFEITOS ESPECTRAIS

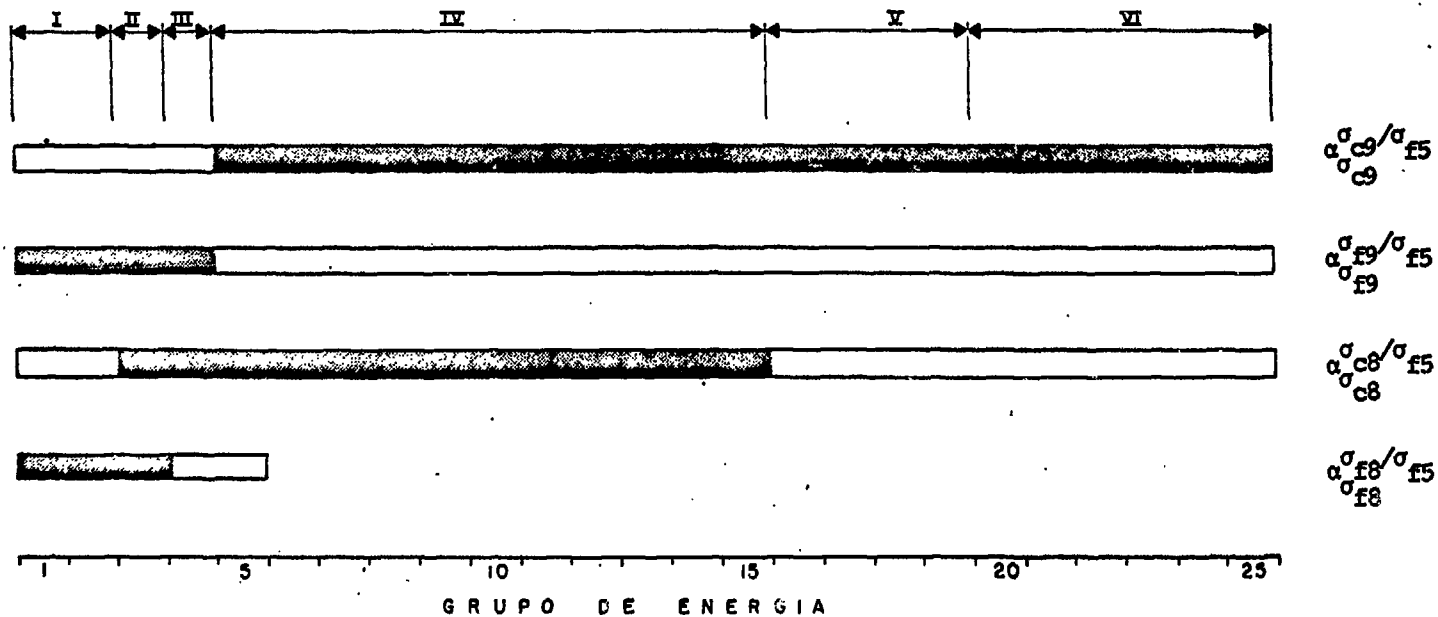


FIG. V.7 - NATUREZA DO EFEITO ESPECTRAL REFERENTE AOS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DE RAZÕES DE TAXAS DE REAÇÕES CENTRAIS, NO ZPR-3-48

do efeito espectral, diferente para os diversos coeficientes de sensibilidade, dependendo do tipo de reação questionada, os reagrupamentos devem ser tais que em uma certa faixa de energia não existam efeitos de sinais contrários ao considerar-se os coeficientes de uma certa reação ou do conjunto de reações. Levando-se em conta este critério, a observação nos induz a considerar as faixas de energia apresentadas na tabela (V.2).

TABELA V.2

FAIXA DE ENERGIA	GRUPO	LIMITES DE ENERGIA
I	1 a 2	2,23 - 14,5 MeV
II	3	1,35 - 2,23 MeV
III	4	0,821 - 1,35 MeV
IV	5 a 15	3,36 - 821 KeV
V	16 a 19	0,454 - 3,36 KeV
VI	20 a 25	Térmica - 454 eV

Foram então computados os valores de α_I e α_T para as faixas de energia acima mencionadas.

Observamos na tabela (V.3) que para os reagrupamentos acima referidos, apesar da faixa de energia razoavelmente grande para a maioria dos casos, as diferenças entre os valores de α_I e α_T para o k_{eff} são insignificantes, exceto para a faixa IV de $\alpha_{\sigma_{f9}}^k$, onde uma notada diferença se faz sentir.

Com as sensibilidades das razões de taxas de reações centrais observou-se que os reagrupamentos para a faixa I

TABELA V.3 - REAGRUPAMENTOS PARA OS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DAS RAZÕES DE TAXAS DE REAÇÕES CENTRAIS σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} E σ_{c9}/σ_{f5} E DO K_{eff} , NO ZPR-3-48, PARA A σ_{f8} , σ_{c8} , σ_{f9} E σ_{c9} , PARA AS FAIXAS DE ENERGIA DA TABELA (V.2).

TIPO DE ESTIMATIVA	1 a 2 (faixa I)		5 a 15 (faixa IV)		16 a 19 (faixa V)	
	α_I	α_T	α_I	α_T	α_I	α_T
$\alpha_{\sigma_{f8}/\sigma_{f5}}$	0,5277	0,5285	-	-	-	-
$\alpha_{\sigma_{c8}/\sigma_{f5}}$	0,0045	0,0045	0,7564	0,7599	0,1303	0,1303
$\alpha_{\sigma_{f9}/\sigma_{f5}}$	0,0602	0,0601	0,7389	0,7358	0,1075	0,1074
$\alpha_{\sigma_{c9}/\sigma_{f5}}$	0,0003	0,0003	0,5854	0,5882	0,2564	0,2577
$\alpha_{k_{\sigma_{f8}}}$	0,0519	0,0520	-	-	-	-
$\alpha_{k_{\sigma_{c8}}}$	-0,0011	-0,0010	-0,1636	-0,1635	-0,0219	-0,0218
$\alpha_{k_{\sigma_{f9}}}$	0,0349	0,0349	0,3807	0,3999	0,0488	0,0491
$\alpha_{k_{\sigma_{c9}}}$	0,0000	0,0000	-0,0416	-0,0418	-0,0231	-0,0231

mostraram-se excelentes com exceção de $\alpha_{\sigma_{f8}/\sigma_{f5}}$, onde uma pequena diferença pode ser observada entre α_I e α_T . Para a faixa IV notadas diferenças se fazem sentir para os vários casos, o que é devido à grande largura desta faixa. Para a faixa V os reagrupamentos mostraram-se altamente satisfatórios com exceção de $\alpha_{\sigma_{c9}/\sigma_{f5}}$, onde uma pequena diferença pode ser observada entre α_I e α_T .

Este procedimento permitiu reduzir em alguns casos as diferenças existentes entre α_I e α_T , e identificar também as faixas de energia que carecem de uma análise especial.

Examinando-se em conjunto as observações feitas anteriormente, concluímos que para a faixa de 16 a 19 o reagrupamento mostrou-se razoável; o problema está na faixa de 5 a 15.

De modo a evitar uma série de combinações, com cálculos onerosos, para o estudo dos melhores reagrupamentos a serem realizados, resolvemos tentar obter indicações coerentes sobre estes, a partir do estabelecimento de uma equivalência entre a estrutura de grupos ABBN e CADARACHE, tendo em vista o consagrado uso da primeira destas, inclusive por BARRE^(2,3) em 1968, antes do advento da biblioteca que ora utilizamos.

Na tabela (V.4) apresentamos a equivalência entre as duas estruturas de grupos.

Observamos que a de CADARACHE apresenta um melhor refinamento com os grupos de alta energia, onde notamos a sub-

divisão de alguns grupos e um menor esmero com os grupos de baixa energia, onde vários deles foram reagrupados.

TABELA V.4 - EQUIVALÊNCIA ENTRE A ESTRUTURA ABBN E CADARACHE

ABBN	CADARACHE
1 e 2	1
3	2
4	3
5	4
6	5
7	6 e 7
8	8
9	9 e 10
10	11
11	12 e 13
12	14
13	15
14	16 e 17
15	18 e 19
16	20
17	21
18 e 19	22
20 e 21	23
22, 23 e 24	24
25	25

Pensando-se em utilizar, no estágio final dos cálculos das sensibilidades, uma estrutura de grupos que se conciliasse com a estrutura ABBN, poderíamos efetuar os seguintes reagrupamentos:

6 a 7

9 a 10

12 a 13

16 a 17

18 a 19

Adicionalmente, resolvemos testar ainda as opções: 9 a 11 e 10 a 11.

Observamos que estes reagrupamentos se harmonizam com as faixas definidas a partir da figura (V.7).

Os valores obtidos encontram-se nas tabelas (V.5) à (V.7).

Conforme observado, a comparação de α_I e α_T mostra-nos que os reagrupamentos considerados foram altamente satisfatórios. Assim sendo, a nova estrutura de grupos adotada daqui por diante, que denominaremos de SENSI, é mostrada na tabela (V.8).

Observando-se a alta qualidade dos resultados, poderíamos pensar em juntar novos grupos à estrutura anterior, porém consideramos o número de 14 grupos como razoável, o que já irá propiciar para os cálculos futuros uma boa economia computacional. Do ponto de vista do ajuste de seções de choque este número ainda é elevado, como veremos adiante.

TABELA V.5 - REAGRUPAMENTOS PARA OS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{c8}/σ_{f5} E DO K_{eff} , NO ZPR-3-48, PARA A σ_{c8}

REAGRUPAMENTO	$\alpha_{\sigma_{c8}/\sigma_{f5}}$		$\alpha_{\sigma_{c8}}^k$	
	α_I	α_T	α_I	α_T
6 a 7	0,1050	0,1050	- 0,0265	- 0,0265
9 a 10	0,1434	0,1435	- 0,0344	- 0,0344
9 a 11	0,2385	0,2389	- 0,0548	- 0,0548
10 a 11	0,1697	0,1698	- 0,0386	- 0,0386
12 a.13	0,1848	0,1849	- 0,0348	- 0,0348
16 a 17	0,0864	0,0864	- 0,0144	- 0,0144
18 a 19	0,0439	0,0439	- 0,0075	- 0,0074

TABELA V.6 - REAGRUPAMENTOS PARA OS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{f9}/σ_{f5} E DO K_{eff} , NO ZPR-3-48, PARA A σ_{f9}

REAGRUPAMENTO	$\alpha_{\sigma_{f9}/\sigma_{f5}}$		$\alpha_{\sigma_{f9}}^k$	
	α_I	α_T	α_I	α_T
6 a 7	0,2042	0,2042	0,1116	0,1125
9 a 10	0,1317	0,1317	0,0722	0,0726
9 a 11	0,1927	0,1925	0,1050	0,1060
10 a 11	0,1220	0,1219	0,0671	0,0674
12 a 13	0,0933	0,0932	0,0493	0,0494
16 a 17	0,0613	0,0613	0,0287	0,0287
18 a 19	0,0461	0,0461	0,0203	0,0204

TABELA V.7 - REAGRUPAMENTOS PARA OS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{c9}/σ_{f5} E DO K_{eff} , NO ZPR-3-48, PARA A σ_{c9}

REAGRUPAMENTO	$\alpha_{\sigma_{c9}/\sigma_{f5}}$		$\alpha_{\sigma_{c9}}^k$	
	α_I	α_T	α_I	α_T
6 a 7	0,0940	0,0940	- 0,0063	- 0,0064
9 a 10	0,0950	0,0950	- 0,0063	- 0,0064
9 a 11	0,1606	0,1607	- 0,0108	- 0,0109
10 a 11	0,1129	0,1129	- 0,0077	- 0,0077
12 a 13	0,1377	0,1377	- 0,0098	- 0,0097
16 a 17	0,1533	0,1535	- 0,0132	- 0,0132
18 a 19	0,1041	0,1042	- 0,0099	- 0,0099

TABELA V.8 - ESTRUTURA DE GRUPOS SENSI, RESULTANTE DO ESTUDO DE REAGRUPAMENTOS

SENSI	REAGRUPAMENTO EFETUADO	LIMITE SUPERIOR DE ENERGIA
I	1 e 2	14,5 MeV
II	3	2,23 MeV
III	4	1,35 MeV
IV	5	821 KeV
V	6 e 7	498 KeV
VI	8	183 KeV
VII	9 e 10	111 KeV
VIII	11	40,9 KeV
IX	12 e 13	24,8 KeV
X	14	9,12 KeV
XI	15	5,53 KeV
XII	16 e 17	3,36 KeV
XIII	18 e 19	1,23 KeV
XIV	20 a 25	454 eV

Finalmente foram testados os reagrupamentos da tabela (V.8) para as sensibilidades do efeito em reatividade do U-235:

$$\alpha_{\sigma_{f8}}^{\rho 5}, \alpha_{\sigma_{c8}}^{\rho 5}, \alpha_{\sigma_{f9}}^{\rho 5} \text{ e } \alpha_{\sigma_{c9}}^{\rho 5}$$

Os valores obtidos de α_I e α_T encontram-se na tabela (V.9).

Conforme podemos observar, os reagrupamentos foram excelentes para $\alpha_{\sigma_{c8}}^{\rho 5}$ e $\alpha_{\sigma_{c9}}^{\rho 5}$. Para $\alpha_{\sigma_{f9}}^{\rho 5}$ e $\alpha_{\sigma_{f8}}^{\rho 5}$ algumas divergências entre α_I e α_T são observadas, as quais porém consideramos toleráveis.

TABELA V.9 - REAGRUPAMENTOS PARA OS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DO EFEITO EM REATIVIDADE DO U-235, NO ZPR-3-48, PARA AS SEÇÕES DE CHOQUE σ_{f8} , σ_{c8} , σ_{f9} e σ_{c9}

REAGRUPAMENTO	$\alpha_{\sigma_{f8}}^{\rho 5}$		$\alpha_{\sigma_{c8}}^{\rho 5}$		$\alpha_{\sigma_{f9}}^{\rho 5}$		$\alpha_{\sigma_{c9}}^{\rho 5}$	
	α_I	α_T	α_I	α_T	α_I	α_T	α_I	α_T
1 a 2	- 0,1782	- 0,1793	0,0024	0,0025	- 0,0770	- 0,0772	0,0000	0,0000
6 a 7	-	-	0,0641	0,0641	- 0,3224	- 0,3255	0,0053	0,0053
9 a 10	-	-	0,0848	0,0847	- 0,2471	- 0,2490	0,0070	0,0069
12 a 13	-	-	0,0869	0,0869	- 0,2053	- 0,2066	0,0191	0,0191
16 a 17	-	-	0,0566	0,0565	- 0,1662	- 0,1669	0,0517	0,0516
18 a 19	-	-	0,0414	0,0413	- 0,1492	- 0,1498	0,0571	0,0571

A alta qualidade dos reagrupamentos, para as estimativas de sensibilidade aqui abordadas, pode ser observada na tabela (V.10), onde são comparados os valores de α_T obtidos com a estrutura de grupos CADARACHE e SENSI.

TABELA V.10 - SENSIBILIDADES TOTAIS PARA A FAIXA DE ENERGIA DO 1º AO 19º GRUPO, COM A ESTRUTURA DE GRUPOS CADARACHE E SENSI

PARÂMETRO INTEGRAL	SEÇÕES DE CHOQUE VARIADAS	α_T (1 a 19)	
		ESTRUTURA CADARACHE	ESTRUTURA SENSI
σ_{f8}/σ_{f5}	σ_{f8}	0,9578	0,9570
σ_{c8}/σ_{f5}	σ_{c8}	0,9506	0,9504
σ_{f9}/σ_{f5}	σ_{f9}	1,0478	1,0479
σ_{c9}/σ_{f5}	σ_{c9}	0,8527	0,8524
k_{eff}	σ_{f8}	0,0890	0,0889
	σ_{c8}	-0,1984	-0,1986
	σ_{f9}	0,5633	0,5618
	σ_{c9}	0,0654	0,0652
ρ_5	σ_{f8}	-0,3144	-0,3133
	σ_{c8}	0,5370	0,5372
	σ_{f9}	-1,9412	-1,9335
	σ_{c9}	0,1791	0,1792

Consideramos finalmente que a validade deste estudo pode ser estendida às demais montagens críticas de nosso trabalho, tendo em vista que os reagrupamentos adotados apoiaram-se basicamente nas considerações de equivalência entre a estrutura de grupos ABBN e CADARACHE, sendo que a primeira, embora não seja tão refinada como a segunda na faixa rápida, tem sido bastante utilizada para o cálculo de reatores rápidos. Pelas mesmas razões expostas acima, consideramos ainda que o critério de reagrupamentos obtido seja válido para outras estimativas de sensibilidade que não foram aqui abordadas.

CAPÍTULO VI

RESULTADOS E CONCLUSÕES

VI.1 - Coeficientes de Sensibilidade em Macrogrupos de Energia

Com os resultados dos reagrupamentos do capítulo precedente, pudemos passar à etapa definitiva dos cálculos. Neste estágio as sensibilidades foram computadas a 14 grupos, na estrutura de grupos SENSI, conforme tabela (V.8).

Para as montagens críticas ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49 foram então computadas as sensibilidades dos parâmetros integrais:

- razões de taxas de reações centrais σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5}
- k_{eff}
- efeito em reatividade central do U-235 (ρ_5).

As seções de choque de alteração consideradas foram as de captura e fissão do U-238 e Pu-239.

As sensibilidades foram obtidas através de uma variação uniforme de +10% aplicada a cada um dos grupos de energia, na estrutura de grupos SENSI, pelas razões expostas na seção III.5.

Segundo a linha de trabalho francesa e japonesa de ajuste de seções de choque^(8,50), as sensibilidades multigrupo são condensadas por simples soma a um número reduzido de grupos de energia.

A escolha dos limites de energia destes macrogrupos depende de⁽⁸⁾:

- comportamento com a energia das funções importância dos diferentes parâmetros integrais.
- faixa de energia coberta pelas diferentes técnicas de medida.
- natureza das seções de choque consideradas.

Neste trabalho resolvemos condensar as sensibilidades obedecendo aos mesmos limites de energia da referência⁽⁸⁾, e portanto colapsamos os valores obtidos em 6 macrogrupos de energia, a partir da estrutura de grupos SENSI, conforme a tabela abaixo:

TABELA VI.1 - LIMITES DE ENERGIA DA ESTRUTURA EM MACROGRUPOS E SUA EQUIVALÊNCIA COM A ESTRUTURA DE GRUPOS SENSI

MACROGRUPOS	EQUIVALÊNCIA COM SENSI	LIMITES DE ENERGIA
A	I e II	1,35 - 14,5 MeV
B	III e IV	0,498 - 1,35 MeV
C	V, VI e VII	40,9 - 498 KeV
D	VIII e IX	9,12 - 40,9 KeV
E	X, XI, XII e XIII	0,454 - 9,12 KeV
F	XIV	têrm. - 454 eV

Os coeficientes de sensibilidade assim obtidos são apresentados nas tabelas (VI.2) à (VI.7).

Tendo em vista o exposto na seção III.2, reunimos os resultados correspondentes às 3 montagens críticas numa mesma tabela, a fim de analisarmos o comportamento das sensibilidades ao amolecimento e endurecimento do espectro.

Uma observação mais cuidadosa dos resultados revela-nos um comportamento bastante regular das sensibilidades de cada macrogrupo em função do parâmetro r , característico da dureza do espectro.

Para uma melhor análise destes coeficientes, plotamos as sensibilidades obtidas com estes macrogrupos em função do parâmetro r , para as situações preponderantes, ou seja, aquelas referentes à σ_{c8} e σ_{f9} , e para os 3 tipos de parâmetros integrais analisados. Das 4 razões de taxas de reações, escolhemos a σ_{f9}/σ_{f5} .

Os gráficos obtidos são apresentados nas figuras (VI.1) à (VI.6).

Observamos que utilizando uma escala monologarítmica os pontos plotados puderam ser aproximados por segmentos de retas, com raras exceções.

Observamos também que os coeficientes angulares das retas correspondentes à cada macrogrupo, para os diferentes parâmetros integrais, são muito semelhantes.

TABELA VI.2 - COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DO k_{eff} , NO ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49, A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA

MACROGRUPOS		SEÇÕES DE CHOQUE DE ALTERAÇÃO			
		σ_{f8}	σ_{c8}	σ_{f9}	σ_{c9}
ZPR-3-50 (r=0,315)	A	0,0796	-0,0037	0,0670	0,0000
	B	0,0032	-0,0170	0,0838	-0,0015
	C	-	-0,0590	0,1744	-0,0127
	D	-	-0,0543	0,0762	-0,0145
	E	-	-0,0738	0,1375	-0,0594
	F	-	-0,0088	0,0242	-0,0128
ZPR-3-48 (r=0,404)	A	0,0851	-0,0041	0,0696	-0,0001
	B	0,0038	-0,0202	0,0969	-0,0018
	C	-	-0,0755	0,2297	-0,0159
	D	-	-0,0552	0,0827	-0,0143
	E	-	-0,0436	0,0829	-0,0331
	F	-	-0,0018	0,0055	-0,0029
ZPR-3-49 (r=0,446)	A	0,0912	-0,0044	0,0723	0,0000
	B	0,0042	-0,0228	0,1058	-0,0019
	C	-	-0,0792	0,2340	-0,0160
	D	-	-0,0528	0,0803	-0,0132
	E	-	-0,0366	0,0684	-0,0255
	F	-	-0,0008	0,0025	-0,0014

TABELA VI.3 - COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DO EFEITO EM REATIVIDADE DO $U-235$, NO ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49, A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA

MACROGRUPOS		SEÇÕES DE CHOQUE DE ALTERAÇÃO			
		σ_{f8}	σ_{c8}	σ_{f9}	σ_{c9}
ZPR-3-50 ($r=0,315$)	A	-0,2810	0,0082	-0,1539	0,0001
	B	-0,0138	0,0397	-0,2167	0,0012
	C	-	0,1543	-0,5195	0,0113
	D	-	0,1251	-0,2718	0,0217
	E	-	0,2335	-0,6692	0,1974
	F	-	0,0659	-0,1996	0,0937
ZPR-3-48 ($r=0,404$)	A	-0,2977	0,0086	-0,1582	0,0001
	B	-0,0156	0,0448	-0,2504	0,0015
	C	-	0,1841	-0,7137	0,0152
	D	-	0,1366	-0,3321	0,0257
	E	-	0,1631	-0,4791	0,1367
	F	-	0,0162	-0,0549	0,0259
ZPR-3-49 ($r=0,446$)	A	-0,3178	0,0093	-0,1624	0,0001
	B	-0,0175	0,0499	-0,2740	0,0016
	C	-	0,1904	-0,7402	0,0150
	D	-	0,1316	-0,3342	0,0243
	E	-	0,1426	-0,4176	0,1114
	F	-	0,0082	-0,0281	0,0135

TABELA VI.4 - COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{f8}/σ_{f5} , NO ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49, A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA

MACROGRUPOS		SEÇÕES DE CHOQUE DE ALTERAÇÃO			
		σ_{f8}	σ_{c8}	σ_{f9}	σ_{c9}
ZPR-3-50 ($r=0,315$)	A	0,9255	-0,0004	-0,0160	0,0000
	B	0,0360	0,0176	0,0467	0,0011
	C	-	0,0709	0,1059	0,0184
	D	-	0,0743	0,0488	0,0222
	E	-	0,1013	0,1105	0,0847
	F	-	0,0119	0,0241	0,0177
ZPR-3-48 ($r=0,404$)	A	0,9185	-0,0006	-0,0161	0,0000
	B	0,0385	0,0211	0,0546	0,0020
	C	-	0,0962	0,1421	0,0243
	D	-	0,0823	0,0550	0,0243
	E	-	0,0661	0,0728	0,0525
	F	-	0,0028	0,0064	0,0466
ZPR-3-49 ($r=0,446$)	A	0,9134	-0,0006	-0,0162	0,0000
	B	0,0394	0,0237	0,0599	0,0021
	C	-	0,1028	0,1463	0,0251
	D	-	0,0817	0,0545	0,0239
	E	-	0,0583	0,0625	0,0435
	F	-	0,0014	0,0032	0,0023

TABELA VI.5 - COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{c8}/σ_{f5} , NO ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49, A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA

MACROGRUPOS		SEÇÕES DE CHOQUE DE ALTERAÇÃO			
		σ_{f8}	σ_{c8}	σ_{f9}	σ_{c9}
ZPR-3-50 (r=0,315)	A	0,0030	0,0157	0,0011	0,0000
	B	0,0000	0,0694	-0,0025	-0,0001
	C	-	0,2220	-0,0148	-0,0028
	D	-	0,2536	-0,0084	-0,0037
	E	-	0,3820	0,0124	0,0121
	F	-	0,0452	0,0054	0,0048
ZPR-3-48 (r=0,404)	A	0,0044	0,0182	0,0009	0,0000
	B	0,0001	0,0888	-0,0031	-0,0001
	C	-	0,3072	-0,0255	-0,0048
	D	-	0,2802	-0,0152	-0,0066
	E	-	0,2560	0,0050	0,0062
	F	-	0,0108	0,0018	0,0016
ZPR-3-49 (r=0,446)	A	0,0053	0,0202	0,0009	0,0000
	B	0,0001	0,1020	-0,0035	-0,0001
	C	-	0,3209	-0,0292	-0,0056
	D	-	0,2757	-0,0178	-0,0078
	E	-	0,2253	0,0004	-0,0024
	F	-	0,0053	0,0009	0,0008

TABELA VI.6 - COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{f9}/σ_{f5} , NO ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49, A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA

MACROGRUPOS		SEÇÕES DE CHOQUE DE ALTERAÇÃO			
		σ_{f8}	σ_{c8}	σ_{f9}	σ_{c9}
ZPR-3-50 (r=0,315)	A	-0,0030	0,0000	0,1154	0,0000
	B	-0,0001	0,0008	0,1478	0,0000
	C	-	0,0125	0,3135	0,0033
	D	-	0,0160	0,1399	0,0050
	E	-	0,0169	0,2789	0,0136
	F	-	0,0015	0,0545	0,0022
ZPR-3-48 (r=0,404)	A	-0,0036	0,0000	0,1243	0,0000
	B	-0,0002	0,0008	0,1745	0,0000
	C	-	0,0201	0,4196	0,0050
	D	-	0,0229	0,1541	0,0072
	E	-	0,0152	0,1754	0,0118
	F	-	0,0006	0,0134	0,0010
ZPR-3-49 (r=0,446)	A	-0,0041	0,0000	0,1336	0,0000
	B	-0,0003	0,0009	0,1936	0,0000
	C	-	0,0231	0,4309	0,0055
	D	-	0,0247	0,1514	0,0077
	E	-	0,0154	0,1487	0,0114
	F	-	0,0003	0,0065	0,0005

TABELA VI.7 - COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{c9}/σ_{f5} , NO ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49, A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA

MACROGRUPOS		SEÇÕES DE CHOQUE DE ALTERAÇÃO			
		σ_{f8}	σ_{c8}	σ_{f9}	σ_{c9}
ZPR-3-50 ($\tau=0,315$)	A	0,0067	0,0000	0,0007	0,0009
	B	0,0003	-0,0021	-0,0028	0,0157
	C	-	-0,0224	-0,0272	0,1338
	D	-	-0,0412	-0,0280	0,1436
	E	-	-0,0918	-0,1031	0,4328
	F	-	-0,0096	-0,0192	0,0989
ZPR-3-48 ($\tau=0,404$)	A	0,0084	-0,0001	0,0002	0,0014
	B	0,0004	-0,0027	-0,0031	0,0257
	C	-	-0,0379	-0,0317	0,2389
	D	-	-0,0642	-0,0448	0,2034
	E	-	-0,0916	-0,1014	0,3830
	F	-	-0,0037	-0,0080	0,0310
ZPR-3-49 ($\tau=0,446$)	A	0,0099	-0,0001	0,0000	0,0016
	B	0,0006	-0,0031	-0,0033	0,0319
	C	-	-0,0451	-0,0505	0,2711
	D	-	-0,0697	-0,0484	0,2191
	E	-	-0,0885	-0,0944	0,3501
	F	-	-0,0021	-0,0046	0,0163

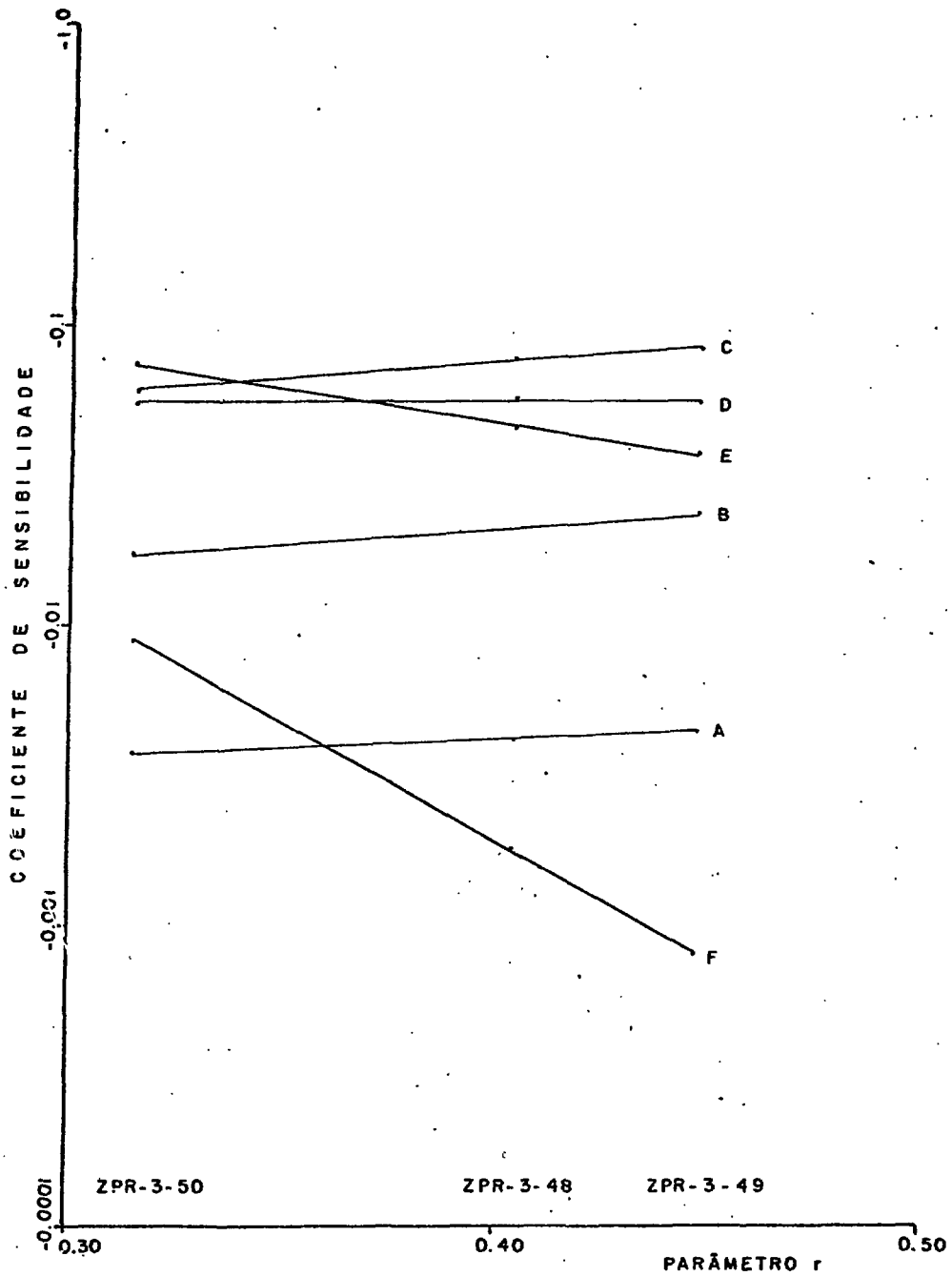


FIG. VI.1 - SENSIBILIDADES DO k_{eff} PARA A σ_{c8} A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA, EM FUNÇÃO DO PARÂMETRO r , PARA O ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49

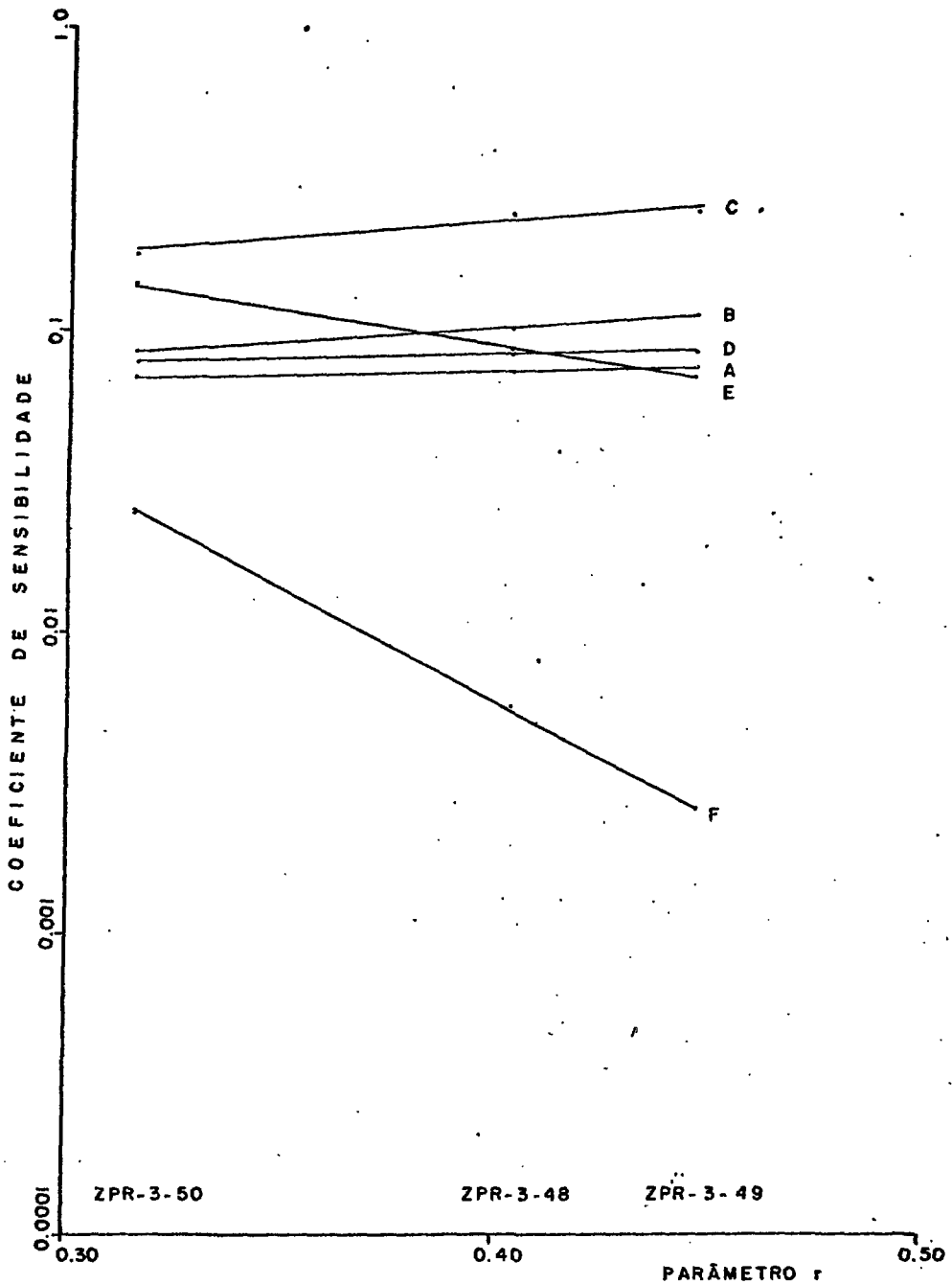


FIG. VI.2 - SENSIBILIDADES DO k_{eff} PARA A σ_{f9} A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA, EM FUNÇÃO DO PARÂMETRO r , PARA O ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49

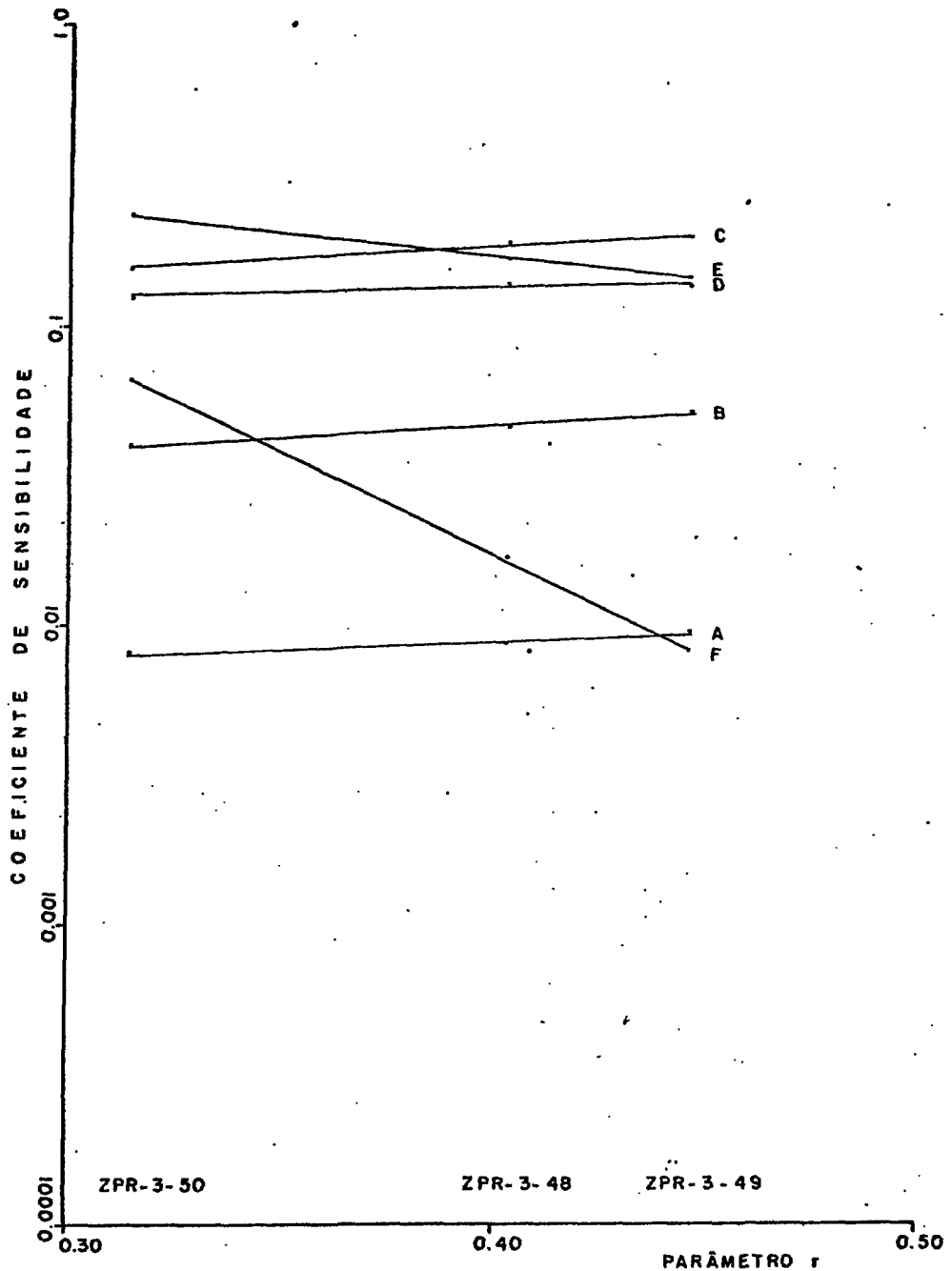


FIG. VI.3 - SENSIBILIDADES DO EFEITO EM REATIVIDADE CENTRAL DO U-235 PARA A σ_{c8} A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA, EM FUNÇÃO DO PARÂMETRO r , PARA O ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49

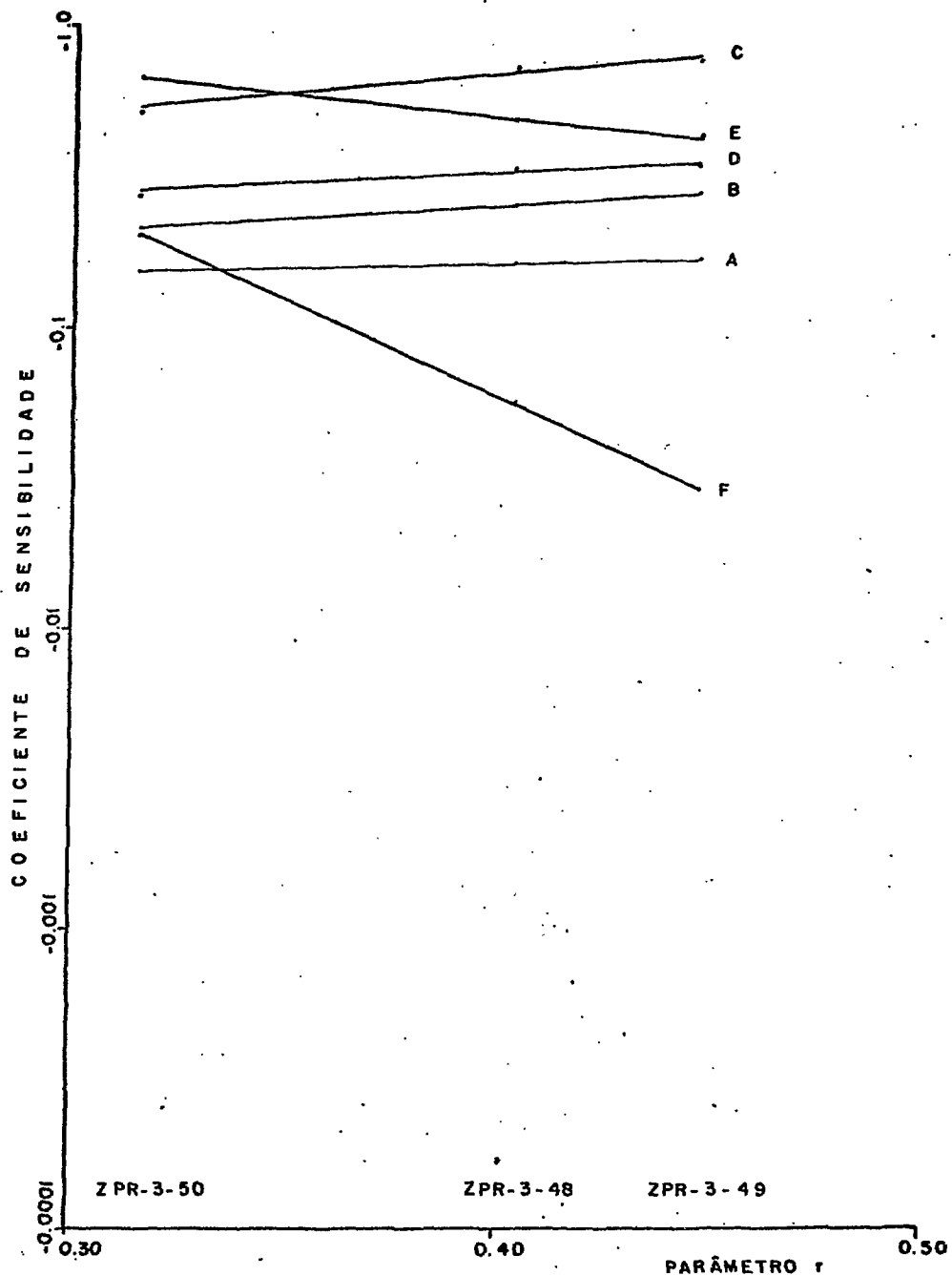


FIG. VI.4 - SENSIBILIDADES DO EFEITO EM REATIVIDADE CENTRAL DO U-235 PARA A σ_{f9} A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA, EM FUNÇÃO DO PARÂMETRO r , PARA O ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49

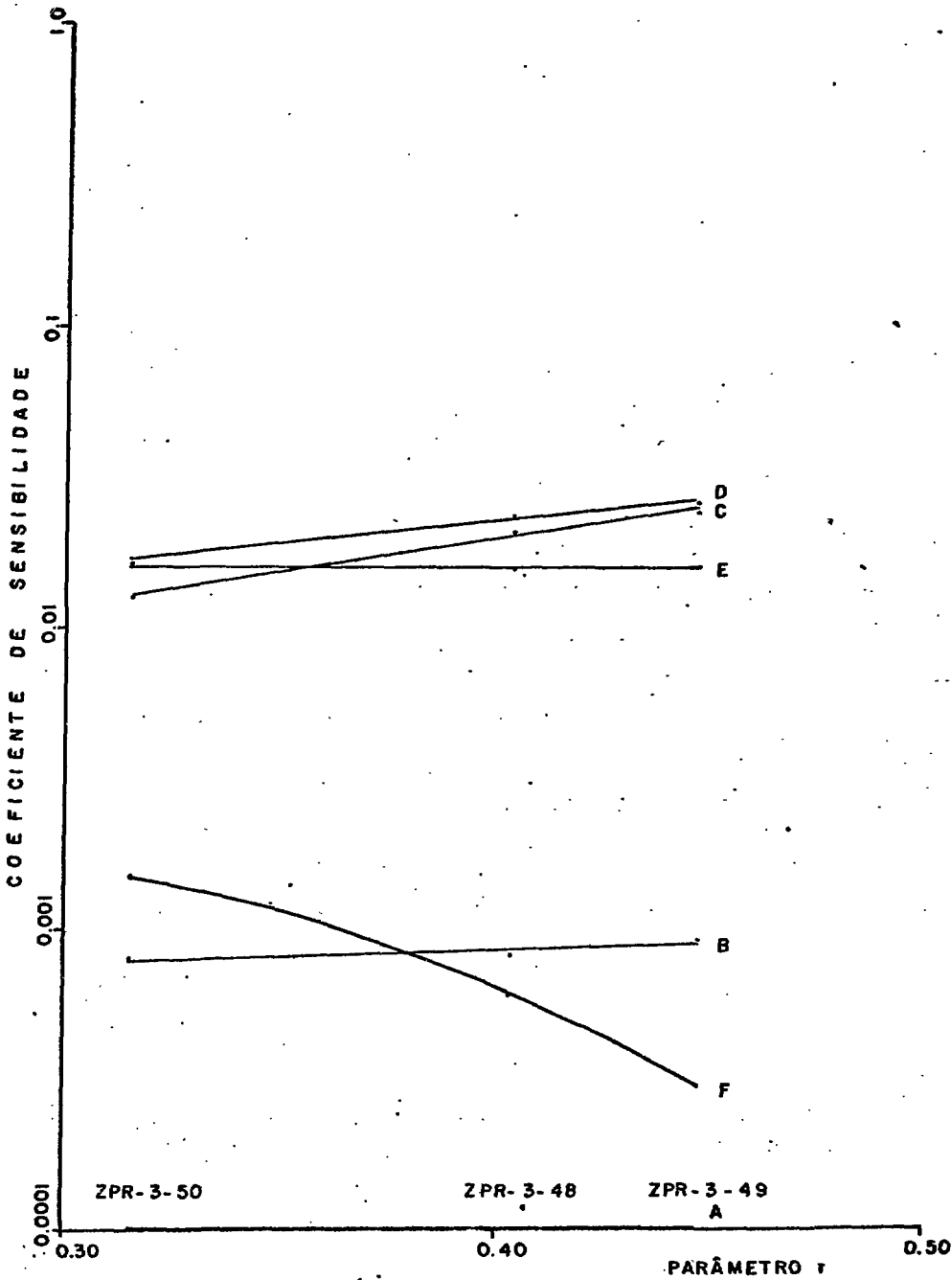


FIG. VI.5 - SENSIBILIDADES DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{f9}/σ_{f5} PARA A σ_{c8} A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA, EM FUNÇÃO DO PARÂMETRO r , PARA O ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49

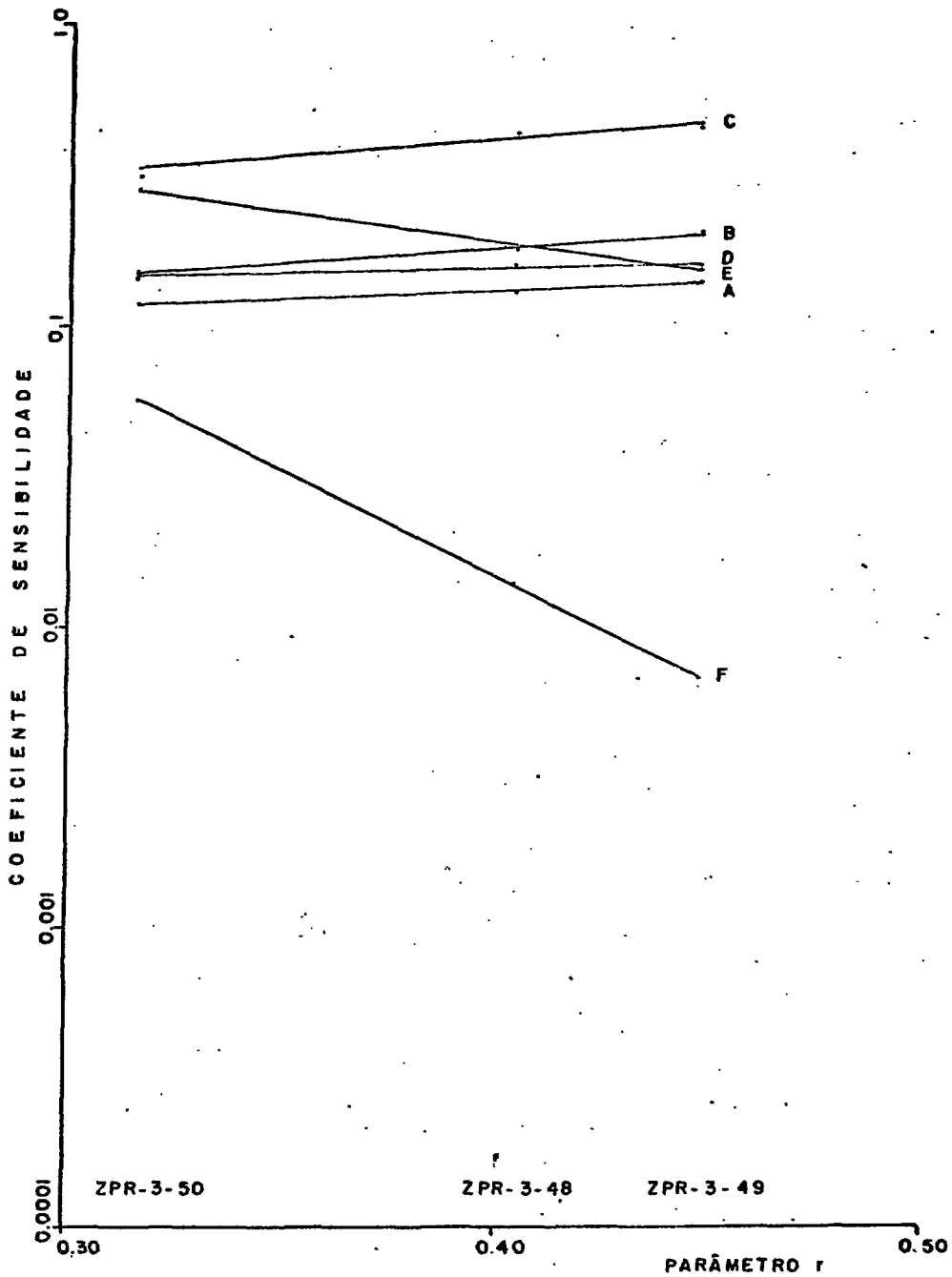


FIG. VI.6 - SENSIBILIDADES DA RAZÃO DE TAXA DE REAÇÃO CENTRAL σ_{f9}/σ_{f5} PARA A σ_{f9} A 6 MACROGRUPOS DE ENERGIA, EM FUNÇÃO DO PARÂMETRO r , PARA O ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49

Podemos concluir que o comportamento dos coeficientes de sensibilidade na faixa de espectro definida para estas três montagens críticas é bastante regular e bem definido. Em vista disto, a partir dos resultados obtidos, é possível fazer-se uma estimativa razoável para a maioria das sensibilidades em macro grupos analisadas neste trabalho, para outras montagens críticas de características similares à estas analisadas e que se encontrem dentro desta faixa de espectro. Tal procedimento deve, no entanto, ser considerado com certa reserva para o caso de α_{f9}^{p5} , tendo em vista o fato de que a qualidade destas sensibilidades ter-se mostrado sensível ao número de grupos, no processo de colapso, conforme poderá ser observado na tabela VI.8 (seção VI.2).

VI.2 - Comparação entre a Estrutura de Grupos SENSI e a Estrutura de Macrogrupos, com o Critério de Sensibilidade Integral

Conforme temos visto no capítulo V, foi possível estabelecermos uma estrutura com 14 grupos de energia para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade. Este número de grupos de energia foi por nós adotado para todas as estimativas, referentes às três montagens críticas selecionadas, por considerarmos esta estrutura de grupos razoavelmente segura para os cálculos, por razões já expostas naquele capítulo.

Temos comentado também que este número de grupos ainda é elevado, devido ao fato do desequilíbrio existente entre o grande número de seções de choque a serem ajustadas e o reduzido número de valores experimentais de parâmetros integrais conhecidos e disponíveis. Queremos ressaltar, no entanto, que uma estrutura mais reduzida que esta a 14 grupos talvez pudesse ser obtida, porém um estudo nesta direção, utilizando-se o critério adotado no capítulo V, necessitaria ser grandemente ampliado, de

forma a incluir a grande variedade de tipos de estimativa de sensibilidade, de sorte a alcançarmos uma solução única e razoavelmente válida para qualquer tipo delas.

Adicionalmente cabe observar que para garantir a validade de um estudo desta natureza seria necessário executá-lo com diversos reatores. O volume de trabalho computacional tornar-se-ia demasiado longo para constar do contexto desta tese.

De forma a contornar esta investigação, resolvemos obter uma estrutura mais reduzida de grupos a partir do critério de computação de sensibilidades totais, conforme temos visto na seção VI.1. Com esta opção de cálculo, conforme já temos comentado na seção V.3, são evitados a introdução de novos erros aos valores dos coeficientes de sensibilidade, sendo este o critério utilizado em CADARACHE⁽⁸⁾ para a obtenção de sensibilidades em macrogrupos, a partir dos valores calculados a 25 grupos.

Nesta seção resolvemos, a título de verificação, comparar os valores de α_I e α_T computados para a montagem crítica ZPR-3-48, para as faixas de energia dos macrogrupos definidos na tabela (VI.1) (5 primeiras faixas). As mesmas estimativas de sensibilidade tratadas no estudo de reagrupamentos do capítulo V são aqui também consideradas.

A partir dos valores de α_I e α_T determinou-se os desvios absolutos para todos os casos analisados e para as 5 primeiras faixas de energia dos macrogrupos da tabela (VI.1). Na tabela (VI.8) são apresentados os valores máximos observados para estes desvios. Na mesma tabela são mostrados, para fins de com

TABELA VI.8 - DESVIOS ABSOLUTOS MÁXIMOS ENTRE α_I e α_T , COM A ESTRUTURA DE GRUPOS SENSI E A ESTRUTURA DE MACROGRUPOS

TIPO DE ESTIMATIVA DE SENSIBILIDADE	DESVIOS ABSOLUTOS MÁXIMOS	
	ESTRUTURA DE GRUPOS SENSI (passagem de 25 para 14 gr.)	ESTRUTURA DE MACROGRUPOS (passagem de 25 para 6 gr.)
$\alpha_{\sigma_{f8}/\sigma_{f5}}$	- 0,0008	- 0,0025
$\alpha_{\sigma_{c8}/\sigma_{f5}}$	- 0,0001	- 0,0005
$\alpha_{\sigma_{f9}/\sigma_{f5}}$	0,0001	0,0007
$\alpha_{\sigma_{c9}/\sigma_{f5}}$	- 0,0002	- 0,0030
$\alpha_{\sigma_{f8}}^k$	- 0,0001	- 0,0006
$\alpha_{\sigma_{c8}}^k$	- 0,0001	- 0,0001
$\alpha_{\sigma_{f9}}^k$	- 0,0009	- 0,0059
$\alpha_{\sigma_{c9}}^k$	0,0001	0,0001
$\alpha_{\sigma_{f8}}^{\rho 5}$	0,0011	0,0042
$\alpha_{\sigma_{c8}}^{\rho 5}$	0,0001	0,0006
$\alpha_{\sigma_{f9}}^{\rho 5}$	0,0031	0,0247
$\alpha_{\sigma_{c9}}^{\rho 5}$	0,0001	0,0006

paração, os desvios absolutos máximos determinados a partir dos valores de α_I e α_T calculados para a estrutura de grupos SENSI, referentes às 13 primeiras faixas.

Observamos nesta tabela que em vários casos os desvios absolutos máximos entre α_I e α_T são insignificantes, concluindo-se disto que os limites de energia destes macrogrupos são tais que foi possível evitar, nestes casos, o fenômeno de superposição de efeitos provocados pelas variações das seções de choque, referido na seção V.3. Em certos casos porém obtivemos desvios que consideramos exagerados, como é o caso de $\alpha_{\sigma_{fg}}^{p5}$. Assim sendo, podemos concluir que a redução do número de grupos de energia através de reagrupamentos, com o critério utilizado no capítulo V, para as faixas de energia de macrogrupos da tabela (VI.1), embora possa ser utilizada satisfatoriamente em vários casos, não pode ser considerada como uma solução geral, como seria de nosso interesse, e tendo em vista também o que já foi comentado no início desta seção.

VI.3 - Utilização da Estrutura de Macrogrupos em um Processo de Ajuste

A utilização das sensibilidades em macrogrupos de energia em um processo de ajuste implica numa consequente condensação das seções de choque a serem ajustadas (σ) e de seus respectivos desvios padrões ($\Delta\sigma$) na mesma estrutura de macrogrupos. Para este fim utiliza-se um fluxo de condensação caracterizado como um fluxo padrão, podendo ser definido conforme indicações da referência (26). Em nosso caso podemos porém utilizar o fluxo de condensação apresentado no anexo (10) da referência (10), devido ao fato de ser este um fluxo padrão já definido para o sistema de cálculo CARNAVAL II⁽⁵⁾. Portanto, as seções de choque e seus

respectivos desvios padrões, para cada macrogrupo G , são calculados por:

$$\sigma_G = \frac{\sum_{g \in G} \phi_g \sigma_g}{\sum_{g \in G} \phi_g} \quad (\text{VI.1})$$

ou:

$$\sigma_G = \sum_{g \in G} \phi'_g \sigma_g$$

e

$$\Delta \sigma_G = \sum_{g \in G} \phi'_g \Delta \sigma_g \quad (\text{VI.2})$$

sendo os fluxos ϕ'_g normalizados à unidade dentro do macrogrupo G , isto é:

$$\sum_{g \in G} \phi'_g = 1$$

Sendo M o número de macrogrupos, o ajustamento conduzirá a M valores X_G , que são os fatores de ajustamento para as seções de choque de macrogrupo.

Como os fatores de ajuste que nos interessam são aqueles para a estrutura original de grupos do HETAIRE⁽¹⁰⁾, a 25 grupos, permanece o problema de como obtê-los a partir dos fatores de ajustamento X_G .

É possível estruturar vários procedimentos para a obtenção destes fatores a 25 grupos, porém é desejável que isto seja feito de tal forma que obtenhamos uma curva suave para estes fatores, sem descontinuidades entre os macrogrupos de

energia vizinhos.

Devido à diretriz de nosso trabalho, este assunto passa a merecer uma atenção especial, razão pela qual é abordado nesta tese.

No apêndice E é apresentada uma solução para este problema.

VI.4 - Conclusões

O desenvolvimento deste trabalho teve como finalidade, em conjunção com os da referência (1), fornecer subsídios à sistemática de ajuste de seções de choque multigrupo do contexto do Programa de Reatores Rápidos do Instituto de Engenharia Nuclear.

Convém ressaltar que o estudo aqui realizado não possuía como objetivo a obtenção de resultados que pudessem ser utilizados na prática, porém analisar a parte metodológica envolvida nos cálculos de sensibilidade, para fins de ajuste de seções de choque, procurando-se abordar os principais problemas envolvidos.

Conforme temos visto no capítulo IV, a estimativa variacional mostrou-se razoavelmente acurada para a computação dos coeficientes de sensibilidade para a maioria dos casos, apesar de que alguns desvios tenham sido observados entre os valores calculados com esta estimativa e os obtidos com o método direto.

Devido à necessidade da redução do número de grupos de energia, foi estabelecida no capítulo V uma estrutura a 14 grupos de energia (SENSI) para a computação desses coeficientes. Neste estudo procurou-se chegar a uma solução tal que os novos erros introduzidos às estimativas fossem mínimos, conforme podemos verificar do exame das tabelas (V.10) e (VI.8), e cuja validade pudesse ser considerada para os diversos tipos de estimativas de sensibilidade.

Do ponto de vista computacional, para um caso de ajuste, com a estrutura de grupos original, como o citado nas referências (7) e (8), são necessários 59488 estimativas de (α) . Com a estrutura de grupos SENSI podemos reduzir o número de estimativas para 31460 casos. Apesar disto se consistir uma economia computacional razoável, seria desejável que este número de grupos fosse menor, pois assim sendo conseguiríamos adicionalmente o necessário equilíbrio entre o número de seções de choque a serem ajustadas e o número de valores medidos de parâmetros integrais, evitando-se a colapso discutida na seção VI.1, embora que os limiares daqueles macrogrupos tenham sido escolhidos com base em certos critérios, conforme temos visto naquela seção.

Na verificação que fizemos na seção VI.2 vimos que a redução do número de grupos de energia através de reagrupamentos, com o critério utilizado no capítulo V, para as faixas de energia de macrogrupos da tabela (VI.1), embora tenha apresentado resultados satisfatórios em vários casos, não pode ser considerada como uma solução geral, tendo em vista a existência de certos desvios que consideramos exagerados, como é o caso de

σ_{f9}^{05} , bem como por carecer este estudo de uma análise mais profunda. Cabe no entanto ressaltar que um julgamento definitivo sobre a importância dos erros porventura existentes na avaliação dos coeficientes de sensibilidade só pode ser feito através da análise de resultados obtidos por métodos estatísticos de ajuste, tendo em vista as possibilidades de ocorrência de fenômenos como superposição, cancelamento e propagação de erros, difíceis de se analisar analiticamente. Como o tratamento deste assunto excederia os limites estipulados para este trabalho, deixamos como recomendação para futuros trabalhos a verificação da influência das imprecisões desses coeficientes sobre os resultados de um ajuste de seções de choque.

Dos estudos aqui desenvolvidos podemos concluir ainda que é importante que a fase preliminar dos trabalhos de ajuste de seções de choque, que envolve a coleta e seleção dos valores experimentais dos parâmetros integrais e a consequente seleção dos reatores, seja realizada visando sempre que possível a reunião de reatores em grupos, conforme suas características, e que, de preferência, nestes grupos sejam reunidos reatores variantes, como estes de nosso trabalho. Assim procedendo, é possível conhecer razoavelmente o comportamento das sensibilidades na faixa do espectro coberta por um certo grupo de reatores, a partir das sensibilidades calculadas para apenas alguns deles, pertencentes ao grupo considerado. Este é um ponto que gostaríamos de ter tido a oportunidade de aprofundar. Como não foi possível, deixamos como recomendação para trabalhos futuros, estudos desta natureza, com outros conjuntos de reatores de características similares, visando uma comprovação mais conclusiva deste assunto.

Com relação ao que foi dito, é importante ressaltar ainda que com os modelos críticos variantes torna-se mais fácil o estabelecimento de correlações entre os valores dos parâmetros integrais, o que é importante, tendo em vista a sua consideração em certas técnicas de ajuste ⁽³⁹⁾, em adição daquelas já comumente utilizadas (correlações entre valores de seções de choque).

A consideração dessas duas espécies de correlações introduz elos de dependência entre as variáveis envolvidas no ajuste, tornando-o mais realista fisicamente. Como o tratamento destas correlações fugiria ao escopo deste trabalho, embora seja-lhe correlato, deixamos também este assunto como recomendação para futuras investigações.

APÊNDICE A

CONCEITUAÇÃO DA FUNÇÃO IMPORTÂNCIA BASEADA NA
NOÇÃO DE CICLO NEUTRÔNICO (15,16,51)

Consideremos inicialmente um reator crítico, descrito pela equação multigrupo com aproximação da difusão, conforme a equação (II.3):

Para definição da função importância, necessitamos introduzir a noção de ciclo neutrônico.

Um ciclo acima referido começa pela emissão de nêutrons de fissão e termina com a absorção ou fuga de todos estes nêutrons, consistindo isto uma geração de nêutrons.

Investiguemos, em um certo ciclo, a importância dos nêutrons em relação a um fenômeno conhecido. Seja uma reação X, como, por exemplo, a captura de nêutrons por um determinado isótopo L.

A funcional neste caso tem características lineares, sendo do tipo:

$$T = \langle H_1 \phi \rangle \quad (A.1)$$

onde H_1 é a seção de choque da reação X para o isótopo L (Σ_1).

Da definição da importância de nêutrons, segue-se

que se, como resultado dos processos de transporte e colisão, os nêutrons primários dão surgimento aos nêutrons secundários e se, em adição ocorrem x capturas no grupo g , pelo isótopo L , então a importância dos nêutrons primários é igual à soma da importância de todos os nêutrons secundários e do número de capturas (x).

Ciclo 1 (1a. geração de nêutrons):

Consideremos ao começo do ciclo 1 uma densidade N de nêutrons primários emitidos dentro do grupo g . É possível calcular o número de nêutrons sofrendo a reação X durante o ciclo.

A importância $\Gamma_g^*(1)$ de um nêutron do grupo g em relação à reação X , no ciclo 1, é o número de nêutrons sofrendo a reação X , para um nêutron primário introduzido no grupo g , neste ciclo.

A função $\Gamma_g^*(1)$ é um vetor de componentes:

$$\Gamma_g^*(1) \quad (g = 1, 2, 3, \dots, G) \quad (A.2)$$

Se introduzirmos N nêutrons primários no grupo g , no ciclo 1, em uma geração eles irão produzir uma quantidade y de nêutrons dada por:

$$y = Nd_g \sum_A^g \quad (A.3)$$

onde:

d_g é o percurso do nêutron com a energia inicial g , durante o processo,

e

Σ_A^g é a soma da seção de choque total (Σ_C^g) com as fugas ($D_g B^2$)

A importância total introduzida é pois:

$$I_Y(1) = Nd_g \Sigma_A^g \Gamma_g^*(1) \quad (A.4)$$

Por outro lado, o número de nêutrons sofrendo a reação X, por um isótopo L e no grupo g é:

$$x = Nd_g \Sigma_i^g \quad (A.5)$$

A importância de cada um destes nêutrons é igual à unidade, devido ao fato de terem sofrido a reação X no grupo g, neste ciclo.

A importância destes nêutrons tomados juntamente é pois:

$$I_X(1) = Nd_g \Sigma_i^g \quad (A.6)$$

É aparente, no entanto, que a importância dos nêutrons não mais suscetíveis de sofrer a reação X é nula.

O número de nêutrons emitidos do grupo g para o grupo g' é dado por:

$$z = Nd_g \Sigma^{g+g'} \quad (A.7)$$

onde:

$\Sigma^{g+g'}$ é a seção de choque de espalhamento.

A importância destes nêutrons é então:

$$I_z(1) = N_d \sum_g \Sigma^{g \rightarrow g'} \Gamma_{g'}^*(1) \quad (\text{A.8})$$

O balanço em importância no ciclo 1, fornece:

$$I_y(1) = I_x(1) + \sum_{g' > g} I_z(1) \quad (\text{A.9})$$

Substituindo as equações (A.4), (A.6) e (A.8) na equação (A.9), dividindo ambos os termos por N_d e arrumando, obtemos:

$$\sum_A \Sigma_A^g \Gamma_g^*(1) - \sum_{g' > g} \Sigma^{g \rightarrow g'} \Gamma_{g'}^*(1) = \Sigma_i^g \quad (\text{A.10})$$

A equação (A.10) pode ser escrita sob a forma matricial como:

$$A^* \Gamma^*(1) = \Sigma_i \quad (\text{A.11})$$

Interessa-nos a seguir determinar a importância dentro do ciclo 1, dos nêutrons dos ciclos anteriores, que denotaremos por 2, 3, ..., k. Devemos então agora considerar uma importância nula a todos os nêutrons que sofreram a reação X em todo ciclo anterior. Apenas os nêutrons capazes de produzir uma fissão possuem uma importância não nula.

Ciclo 2 (2a. geração de nêutrons):

Em sequência, consideremos a introdução de N nêutrons no ciclo 2, no grupo g. A importância total introduzida é pois:

$$I_y(2) = Nd_g \sum_A^g \Gamma_g^*(2) \quad (A.12)$$

A importância, neste ciclo, dos nêutrons emitidos do grupo g para o grupo g' é então:

$$I_z(2) = Nd_g \sum^{g+g'} \Gamma_{g'}^*(2) \quad (A.13)$$

O número de nêutrons que emergem no ciclo 2, oriundos de fissões no ciclo 1, de cada grupo g , estendido a todas as fissões, é dado por:

$$t = Nd_g \lambda v_g \sum_{fis.}^g \sum_{g'=1}^G \chi_{g'} \Gamma_{g'}^*(1) \quad (A.14)$$

onde:

v_g = número médio de nêutrons emitidos por fissão no grupo g

$\sum_{fis.}^g$ = seção de choque de fissão no grupo g

$\chi_{g'}$ = espectro de fissão de grupo, normalizado a 1.

A importância destes nêutrons é então:

$$I_t(2) = Nd_g \lambda v_g \sum_{fis.}^g \sum_{g'=1}^G \chi_{g'} \Gamma_{g'}^*(1) \quad (A.15)$$

O balanço em importância no ciclo 2, fornece:

$$I_y(2) = \sum_{g' > g} I_z(2) + I_t(2) \quad (A.16)$$

Substituindo as equações (A.12), (A.13) e (A.15) na equação (A.16), dividindo ambos os termos por Nd_g e arrumando,

obtemos:

$$\sum_{A_g}^g \Gamma_g^*(2) - \sum_{g' > g} \Sigma^{g+g'} \Gamma_g^*(2) = \lambda \nu \sum_{g \text{ fis.}}^g \chi_{g',g'} \Gamma_{g'}^*(1) \quad (\text{A.17})$$

Sob a forma matricial, pode-se escrever:

$$A^* \Gamma^*(2) = \lambda B^* \Gamma^*(1) \quad (\text{A.18})$$

Ciclo k (k ézima geração de nêutrons):

O resultado do ciclo 2 pode ser generalizado para um ciclo genérico k, portanto, sob a forma matricial, podemos escrever:

$$A^* \Gamma^*(k) = \lambda B^* \Gamma^*(k-1), \quad \forall k \geq 2 \quad (\text{A.19})$$

A variável k, correspondente ao número de gerações, pode ser considerada equivalente ao tempo.

A função $\Gamma^*(k)$ possui um limite finito, ou seja:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Gamma^*(k) = \Gamma_{\ell}^* \quad (\text{A.20})$$

Neste limite, podemos escrever:

$$A^* \Gamma_{\ell}^* = \lambda B^* \Gamma_{\ell}^* \quad (\text{A.21})$$

ou

$$(A^* - \lambda B^*) \Gamma_{\ell}^* = 0$$

Segundo as propriedades da matriz $(A^* - \lambda B^*)$, pode

mos deduzir que:

$$\Gamma_{\ell}^* = c\phi^* \quad (\text{A.22})$$

sendo c um escalar e ϕ^* a solução da equação adjunta, normalizada à:

$$\langle \phi^*, \lambda B\phi \rangle = 1 \quad (\text{A.23})$$

O fluxo ϕ^* sendo equivalente à importância com relação à fissão, observamos que ao fim da k -ésima geração, um nêutron é produtor de uma fissão que predomina.

Consideremos agora o produto interno da equação (A.11), do ciclo 1, com ϕ :

$$\langle A \Gamma^*(1), \phi \rangle = \langle \Sigma_1, \phi \rangle = T \quad (\text{A.24})$$

porém:

$$\langle A\Gamma^*(1), \phi \rangle = \langle \Gamma^*(1), A\phi \rangle = \langle \Gamma^*(1), \lambda B\phi \rangle \quad (\text{A.25})$$

Utilizando a equação (A.25) na equação (A.24), obtém-se:

$$\langle \Gamma^*(1), \lambda B\phi \rangle = \langle \Sigma_1, \phi \rangle = T \quad (\text{A.26})$$

O produto interno da equação (A.19), do ciclo k , com ϕ fornece:

$$\langle A\Gamma^*(k), \phi \rangle = \langle \lambda B\Gamma^*(k-1), \phi \rangle$$

ou:

$$\langle \Gamma^*(k), \lambda B\phi \rangle = \langle \Gamma^*(k-1), \lambda B\phi \rangle = T \quad (\text{A.27})$$

Então:

$$T = \langle \Sigma_1, \phi \rangle = \langle \Gamma^*(1), \lambda B \phi \rangle = \dots = \langle \Gamma^*(k), \lambda B \phi \rangle$$

ou:

$$T = \langle \Gamma^*(k), \lambda B \phi \rangle \text{ para } (k = 1, 2, \dots)$$

(A.28)

Da equação (A.28) transparece pois que a importância de um nêutron ou precursor é a provável contribuição a um arbitrário processo como, por exemplo, uma funcional linear do tipo T , no decurso de k ciclos.

A avaliação da função importância $\Gamma^*(k)$ é razoavelmente simples e corresponde à solução das equações iterativas:

$$A^* \Gamma^*(1) = H_1$$

(A.29)

$$A^* \Gamma^*(k) = \lambda B^* \Gamma^*(k-1) \text{ para } (k = 2, 3, \dots)$$

Como pode ser visto, a solução deste sistema corresponde ao cálculo do fluxo adjunto ϕ^* , começando com uma fonte $S^* = H_1$ e prosseguindo com uma iteração de rotina.

Lembrando que, a partir da equação (A.20) foi possível deduzir a equação (A.22), podemos concluir ainda que:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Gamma^*(k) = c \phi^*$$

(A.30)

Portanto, no limite, quando $k \rightarrow \infty$, podemos concluir, a partir das equações (A.28) e (A.30), que:

$$T = \langle c\phi^*, \lambda B\phi \rangle \quad (\text{A.31})$$

Sendo c um escalar e utilizando a equação (A.23) na equação (A.31), obtemos:

$$T = c \quad (\text{A.32})$$

Portanto, para este caso, c é a taxa não perturbada da reação X , para o isótopo L .

É possível, no entanto, ampliar a aplicabilidade da conceituação acima, definindo-se funções importância $\Gamma^*(k)$ para outros tipos de funcionais de interesse, expressas por razões de funcionais lineares ou bilineares do fluxo real e/ou adjunto. Nestes casos, as funções importância $\Gamma^*(k)$, podem ainda ser avaliadas a partir do sistema de equações (A.29), desde que seja feita uma escolha adequada da fonte S^* .

Por exemplo, consideremos uma razão de funcionais lineares do fluxo real:

$$R = \frac{T_1}{T_2} = \frac{\langle H_i \phi \rangle}{\langle H_j \phi \rangle} \quad (\text{A.33})$$

Pode-se, neste caso, introduzir uma funcional T_0 do tipo:

$$T_0 = \langle G\phi \rangle \quad (\text{A.34})$$

onde G é dado por:

$$G = \frac{H_i}{\langle H_i \phi \rangle} - \frac{H_j}{\langle H_j \phi \rangle} \quad (\text{A.35})$$

Nesta situação, S^* é igual a G , podendo ser facilmente visto para este caso que o coeficiente c da equação (A.22) é igual a zero, e assim a função $\Gamma^*(k)$ passa a ter um limite nulo, quando o $k \rightarrow \infty$. Portanto, uma função importância Γ^* pode ser estimada através da série convergente:

$$\Gamma^* = \sum_{k=1}^{\infty} \Gamma^*(k) \quad (\text{A.36})$$

A utilização desta função importância no estudo dos sistemas perturbados torna possível o cálculo da variação da razão R da equação (A.33), decorrente de alterações nas propriedades do sistema original, sem a necessidade de se calcular o fluxo a cada alteração. Tal procedimento pode ser visto nas referências (15) e (51).

APÊNDICE B

CÁLCULOS REALIZADOS PELO CÓDIGO HETAIRE (5,10)

1. Cálculo Homogêneo

Visa a determinação do fluxo da célula homogeneizada, através de processo iterativo, com o qual serão ponderadas as seções de moderação elástica de 660 grupos para 25 grupos.

A descrição a seguir ilustra o procedimento.

a) Após a ponderação das seções de choque de moderação elástica de 660 grupos para 25 grupos, utilizando-se o fluxo padrão da tabela (III.1) e o cálculo de autoproteção à ressonância dos isótopos pesados, pelo método de subgrupos⁽⁵⁾, é resolvida a equação de balanço de nêutrons sob a forma integral:

$$(D_g B^2 + \Sigma_t^g) \phi_g = \sum_{k \leq g} \Sigma_{k+g} \phi_k + \chi_g S_f \quad (B.1)$$

onde S_f é a fonte de fissão e os demais termos tem o significado habitual.

Um fluxo aproximado é então obtido, o qual é utilizado para começar as iterações.

- b) É calculado a seguir o fluxo fino. Adota-se para tal a aproximação de que o fluxo varia como uma função: $\frac{1}{\Sigma_t(E) E^{n_g}}$, sendo $\Sigma_t(E)$ a seção de choque total do meio e n_g é determinado a partir do fluxo aproximado obtido em a).
- c) Com o fluxo fino obtido em b), é refeita nova ponderação das seções de moderação elástica.
- d) Com as novas seções de moderação elástica um novo fluxo pode ser recalculado utilizando-se a equação (B.1).
- e) Os cálculos são reiniciados em b) até a obtenção da convergência. Obtém-se assim um jogo de seções de choque de moderação elástica definitivo, definido a 25 grupos, a serem utilizados nos cálculos subsequentes.

2. Cálculo Heterogêneo

Neste estágio é resolvida a equação de transporte integral, considerando-se o cálculo da autoproteção à ressonância pelo método de subgrupos. O fluxo da célula é determinado e o parâmetro crítico considerado é o "buckling" material (B^2).

São ainda calculados os diferentes termos do balanço.

Com os resultados precedentes são calculadas as seções de choque macroscópicas da célula, e para cada isótopo constituinte são definidas as seções de choque homogêneas equivalentes σ_{HH}^g , pelo princípio da conservação das taxas de rea-

ções grupo a grupo.

$$\sigma_{HH}^g = \frac{\sum_i N_i V_i \phi_g^i \sigma_g^i}{V_t \bar{N} \bar{\phi}_g} \quad (B.2)$$

com:

$$\bar{\phi}_g = \frac{\sum_i V_i \phi_g^i}{\sum_i V_i}$$

e

$$\bar{N} = \frac{\sum_i N_i V_i}{\sum_i V_i}$$

onde:

i - é o índice de região

V_i - é o volume da região de índice i

N_i - é a concentração isotópica na região de índice i

Na figura (B.1)⁽⁵⁾ é apresentado esquematicamente a estrutura e a série de procedimentos anteriormente descritos, referente ao sistema de cálculo CARNAVAL II, ilustrando a sistemática adotada para os cálculos de célula.

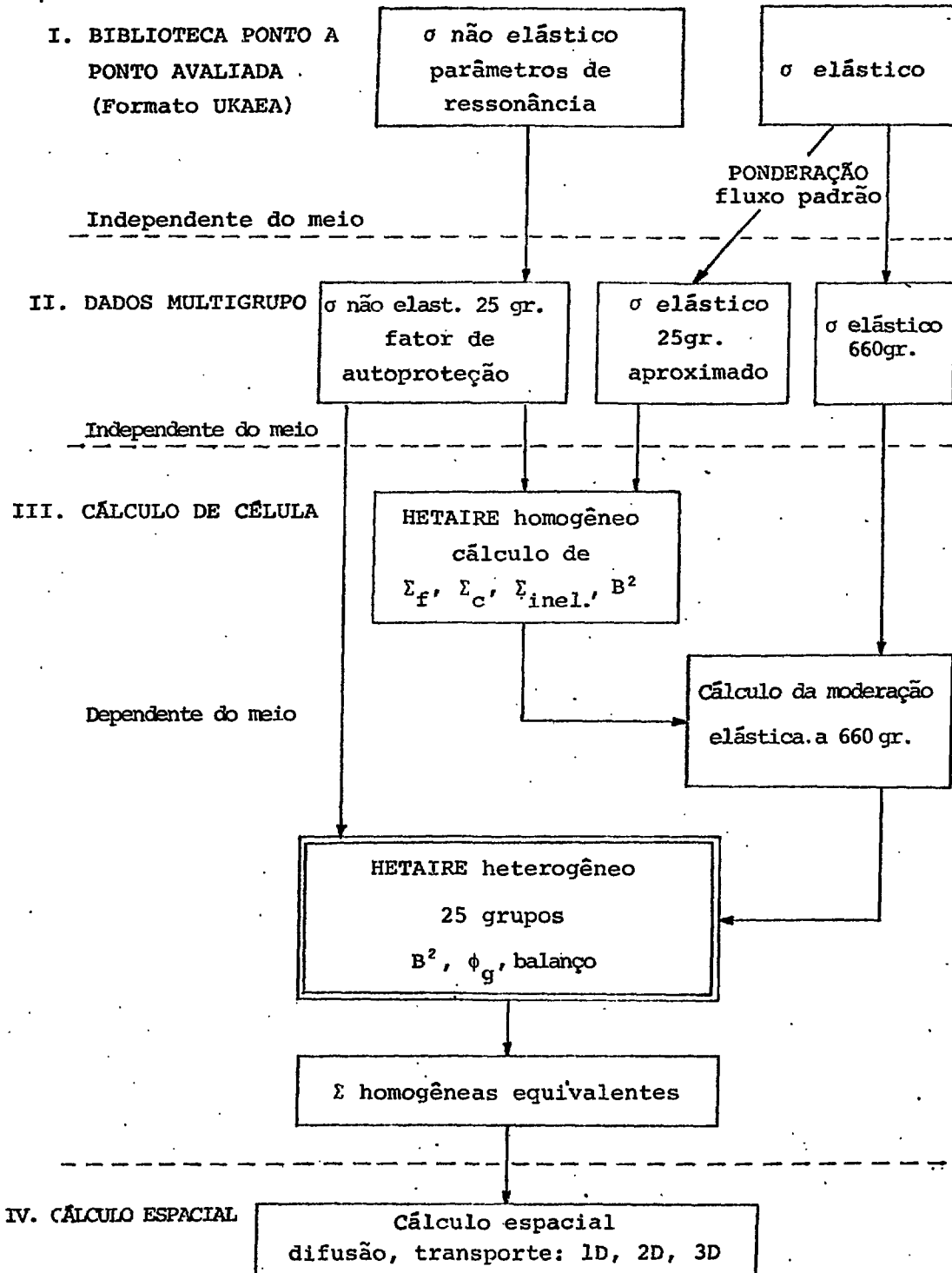


FIG. B.1

APÊNDICE C

VALORES EXPERIMENTAIS E CALCULADOS DOS

PARÂMETROS INTEGRAIS UTILIZADOS

Neste apêndice encontram-se as tabelas (C.1) à (C.6) aonde são mostrados os valores experimentais, obtidos de informações da referência (38), e os valores calculados dos parâmetros integrais utilizados nas análises de sensibilidade, para as montagens críticas ZPR-3-50, ZPR-3-48 e ZPR-3-49.

TABELA C.1 - COMPARAÇÕES ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E CALCULADOS DO k_{eff} E RAZÕES DE TAXAS DE REAÇÕES CENTRAIS σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5} , NO ZPR-3-50

PARÂMETRO INTEGRAL	VALOR EXPERIMENTAL	VALOR CALCULADO	$\frac{C-E}{E}$ %
k_{eff}	1,00000	0,98815	- 1,19
σ_{f8}/σ_{f5}	0,0251	0,0276	9,96
σ_{c8}/σ_{f5}	-	0,1316	-
σ_{f9}/σ_{f5}	0,9030	0,9131	1,12
σ_{c9}/σ_{f5}	-	0,3387	-

TABELA C.2 - COMPARAÇÃO ENTRE O VALOR EXPERIMENTAL E CALCULADO DO EFEITO EM REATIVIDADE DO U-235, EM UNIDADE $(10^{-6} \frac{\Delta k}{k}/g)$, NO ZPR-3-50

ISÓTOPO	VALOR EXPERIMENTAL	VALOR (*) CALCULADO	$\frac{C-E}{E} \%$
U-235	4,989	4,807	- 3,65'

(*) - Estimativa Variacional

TABELA C.3 - COMPARAÇÕES ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E CALCULADOS DO k_{eff} E RAZÕES DE TAXAS DE REAÇÕES CENTRAIS σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5} , NO ZPR-3-48

PARÂMETRO INTEGRAL	VALOR EXPERIMENTAL	VALOR CALCULADO	$\frac{C-E}{E} \%$
k_{eff}	1,00000	0,98274	- 1,73
σ_{f8}/σ_{f5}	0,0307	0,0314	2,28
σ_{c8}/σ_{f5}	0,1380	0,1288	- 6,67
σ_{f9}/σ_{f5}	0,9760	0,9681	- 0,81
σ_{c9}/σ_{f5}	-	0,2642	-

TABELA C.4 - COMPARAÇÕES ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E CALCULADOS DOS EFEITOS EM REATIVIDADE DO U-235, U-238 E Pu-239, EM UNIDADES ($10^{-6} \frac{\Delta k}{k} / g$), NO ZPR-3-48

ISÓTOPO	VALOR EXPERIMENTAL	VALOR (*) CALCULADO	$\frac{C-E}{E} \%$
U-235	3,582	3,722	3,91
U-238	- 0,253	- 0,242	- 4,35
Pu-239	4,772	5,011	5,01

(*) - Estimativa Variacional

TABELA C.5 - COMPARAÇÕES ENTRE OS VALORES EXPERIMENTAIS E CALCULADOS DO k_{eff} E RAZÕES DE TAXAS DE REAÇÕES CENTRAIS σ_{f8}/σ_{f5} , σ_{c8}/σ_{f5} , σ_{f9}/σ_{f5} e σ_{c9}/σ_{f5} , NO ZPR-3-49

PARÂMETRO INTEGRAL	VALOR EXPERIMENTAL	VALOR CALCULADO	$\frac{C-E}{E} \%$
k_{eff}	1,00000	0,99905	- 0,10
σ_{f8}/σ_{f5}	0,0345	0,0345	0,00
σ_{c8}/σ_{f5}	-	0,1270	-
σ_{f9}/σ_{f5}	0,9860	0,9878	0,18
σ_{c9}/σ_{f5}	-	0,2422	-

TABELA C.6 - COMPARAÇÃO ENTRE O VALOR EXPERIMENTAL E CALCULADO DO EFEITO EM REATIVIDADE DO U-235, EM UNIDADE DE $(10^{-6} \frac{\Delta k}{k} / g)$, NO ZPR-3-49

ISÓTOPO	VALOR EXPERIMENTAL	VALOR (*) CALCULADO	$\frac{C-E}{E} \%$
U-235	3,018	3,237	7,26

(*) - Estimativa Variacional

APÊNDICE D

PROGRAMAS HETAVARI8 E FORMTX

ESPECIFICAÇÃO DOS DADOS DE ENTRADA

1º CARTÃO: (Format 4X, 19A4)

TITLE - cartão título

2º CARTÃO: (Format 2I5)

ILIB2 {
= 0 - perturbações dos dados nucleares para cálculo da per-
turbação na reatividade fornecidos através de car-
tões.
= 1 - perturbações dos dados nucleares para cálculo da per-
turbação na reatividade lidos do "data set" 2.

ILIB3 {
= 0 - alterações nos dados nucleares para estruturação das
alterações do sistema original, fornecidos através
de cartões.
= 1 - alterações nos dados nucleares para estruturação das
alterações do sistema original, lidos do "data set" 3.

3º CARTÃO: (Format 3I5)

NG - número de grupos de energia considerados

NF - número de isótopos fissionáveis

NT - número de jogos de seções de choque

4º CARTÃO: (Format 6E11.6)

SPEC (N), N = 1, NG - espectro de fissão

5º CARTÃO: (Format I5)

NTOT - número total de registros correspondentes aos isótopos a serem abordados ($NTOT \leq 23$)

6º CARTÃO: (Format 12I5)

NNR(NL), NL = 1, NTOT - número de identificação do isótopo na fita HETAIRE. Este número deve ser fornecido em ordem crescente, isto é, $NNR(NL+1) > NNR(NL)$

7º CARTÃO: (Format 2I5)

NMIC - número de conjuntos de dados microscópicos.

NMAC - número de conjuntos macroscópicos compostos.

PERFURAR 'NMIC'S CARTÕES, (Format 2I5), contendo:

NISO - número de ordem do registro do isótopo de interesse.

NSETR $\left\{ \begin{array}{l} = 0 - \text{isótopo não fissionável} \\ = 1 - \text{isótopo fissionável} \end{array} \right.$

DEVEM SER PREPARADOS A SEGUIR 'NMAC'S CONJUNTOS DE CARTÕES, ABAIXO DISCRIMINADOS:

NCON - (Format I5) - número de isótopos da composição macroscópica composta.

PERFURAR 'NCON'S CARTÕES, (Format I5, E13.6), contendo:

NISO - número de ordem do registro do isótopo.

CONC - concentração do isótopo (at./cm³ x 10⁻²⁴).

OBS: Para a versão apresentada do programa, os conjuntos macroscópicos só admitem em sua composição isótopos não fissionáveis.


```
STOP
2 IF (I(3).EQ.0.AND.I(5).EQ.1.AND.I(7).EQ.0) GO TO 4
  READ(1) BLK
  DO 80 NL=1,NTOT
  IF (I(1).EQ.NNR(NL)) GO TO 6
80 CONTINUE
  GO TO 3
4 NREG=I(6)*25*4
  READ(1) (BLK(K),K=1,NREG)
  GO TO 3
6 JJ1=1
  NINE=0
  DO 634 N=1,25
  JJ2=JJ1+7
  SIGTOT(L,N)=BLK(JJ1+3)
  CAPT(L,N)=BLK(JJ1+4)
  FISS(L,N)=BLK(JJ1+5)
  UUF1(L,N)=BLK(JJ1+6)
  JJ3=JJ2+N
  DIN(L,N)=BLK(JJ3)
  SIGER(L,N)=BLK(JJ1+7)
  SIREM(L,N)=SIGER(L,N)+CAPT(L,N)+FISS(L,N)+DIN(L,N)
  L1=N-1
  IF(L1) 635,636,635
635 DO 637 LUI=1,L1
  JJ4=JJ2+LUI
  NINE=NINE+1
637 SEMAT(L,NINE)=BLK(JJ4)
636 JJ1=9*N+(N*L1)/2+1
634 CONTINUE
6000 CONTINUE
  NI=NTOT
  XY=0.0
  READ(5,9) NMIC,NMAC
  9 FORMAT(2I5)
  NMI=0
  NMA=0
777 NMI=NMI+1
  IF(NMI.LE.NMIC) GO TO 779
  GO TO 290
779 READ(5,8) NISO,NSETR
  8 FORMAT(2I5)
94 NINF=0
  DO 638 LA=2,25
  NU=LA-1
  DO 639 KAL=1,NU
  NINE=NINE+1
  KOL=LA-KAL
  IF(KOL.EQ.1) GO TO 500
  SMAT(KAL,LA)=SEMAT(NISO,NINE)
  GO TO 639
500 LH=LA-1
  SMAT(KAL,LA)=SEMAT(NISO,NINE)+SIGER(NISO,LH)
639 CONTINUE
```

```
638 CONTINUE
  IF(NMI.LE.NMIC) GO TO 200
  NSETR=0
  INI=IMI+1
  IF(INI.EQ.NCON) GO TO 200
  GO TO 781
200 WRITE(6,1015) (SIREM(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(8,1024) (SIREM(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(6,1016) (SIGTOT(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(8,1024) (SIGTOT(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(6,1017) (NSG(N),N=1,25)
  WRITE(8,1025) (NSG(N),N=1,25)
  WRITE(6,1018)
  JK=1
  DO 655 KK=1,24
  JK=JK+1
  MSG=KK+NSG(KK)
  WRITE(6,1019) (SMAT(KK,J),J=JK,MSG)
  WRITE(8,1024) (SMAT(KK,J),J=JK,MSG)
655 CONTINUE
  WRITE(6,1019) XY
  WRITE(8,1024) XY
  WRITE(6,1020) (CAPT(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(8,1024) (CAPT(NISO,N),N=1,25)
  IF(NSETR.EQ.0) GO TO 774
  WRITE(6,1021) (UFI(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(8,1024) (UFI(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(6,1022) (SPEC(N),N=1,25)
  WRITE(8,1024) (SPEC(N),N=1,25)
  WRITE(6,1023) (FISS(NISO,N),N=1,25)
  WRITE(8,1024) (FISS(NISO,N),N=1,25)
774 IF(NMI.EQ.NMIC) GO TO 290
  GO TO 777
290 NMIC=0
291 IF(NMAC.EQ.0) GO TO 100
820 INJ=0
  NTOT=NTOT+1
  NISO=NTOT
  IF(NISO.GT.(NI+NMAC)) GO TO 100
  DO 28 N=1,25
  SIGTOT(NISO,N)=0.0
  CAPT(NISO,N)=0.0
  DIN(NISO,N)=0.0
  28 SIGER(NISO,N)=0.0
  NINF=0
  DO 29 NINF=1,650
  29 SFMAT(NISO,NINF)=0.0
910 NMA=NMA+1
  IF(NMA.LE.NMAC) GO TO 780
  GO TO 100
780 READ(5,90) NCON
781 READ(5,10) MNISO,CONC
90 FORMAT(115)
```

```
10 FORMAT(1I5,E13.6)
   NINE=0
   DO 6340 N=1,25
   SIGTOT(NISO,N)=SIGTOT(NISO,N)+SIGTOT(MNISO,N)*CONC
   CAPT(NISO,N)=CAPT(NISO,N)+CAPT(MNISO,N)*CONC
   DIN(NISO,N)=DIN(NISO,N)+DIN(MNISO,N)*CONC
   SIGER(NISO,N)=SIGER(NISO,N)+SIGEK(MNISO,N)*CONC
   SIREM(NISO,N)=SIGER(NISO,N)+CAPT(NISO,N)+DIN(NISO,N)
   L1=N-1
   IF(L1) 65,6339,65
65 DO 67 LUI=1,L1
   NINE=NINE+1
   67 SEMAT(NISO,NINE)=SEMAT(NISO,NINE)+SEMAT(MNISO,NINE)*CONC
6339 LIN=0
6340 CONTINUE
   GO TO 94
1015 FORMAT(////3X,'REMOCAO'/(3X,6E11.6))
1016 FORMAT(/3X,'TRANSPORTE'/(3X,6E11.6))
1017 FORMAT(/3X,'GRUPOS DE DOWNSCATTER'/(3X,10I5))
1018 FORMAT(/3X,'SCATTERING')
1019 FORMAT(3X,6E11.6)
1020 FORMAT(/3X,'CAPTURA'/(3X,6E11.6))
1021 FORMAT(/3X,'NU-FISSAO'/(3X,6E11.6))
1022 FORMAT(/3X,'ESPECTRO DE FISSAO'/(3X,6E11.6))
1023 FORMAT(/3X,'FISSAO'/(3X,6E11.6))
1024 FORMAT(6E11.6)
1025 FORMAT(10I5)
   30 WRITE(6,102)
   102 FORMAT(1X,'***DATA CHECK***')
100 STOP
   END
```

```
C
C
C      PROGRAMA FORMIX
C
C      PROGRAMA AUXILIAR PARA FORMATAÇÃO DOS DADOS GERADOS PELO
C      METAVARIS NO FORMAT DE ENTRADA DO COMIGO VARIP. PARA
C      POSTERIOR ARQUIVAMENTO EM DISCO OU PERFORAÇÃO DE CARTÕES
C
      REAL*8 CARD
      DIMENSION CARD(18),CARD1(20)
      DATA BLK,PL/' ','+*/
      DO 10 I=1,10000
      READ(1,100,END=20) CARD,CARD1,+
      IF(M.EQ.BLK) GO TO 5
      DO 1 J=1,6
      INDEX=2+(J-1)*3
1      IF(CARD(INDEX).EQ.BLK) CARD(INDEX)=PL
      WRITE(2,200) CARD
      GO TO 10
5      WRITE(2,300) CARD1
10     CONTINUE
20     STOP
100    FORMAT(6(A7,1X,A1,A2),T1,20A4,T1,A1)
200    FORMAT(6(A7,A1,A2))
300    FORMAT(20A4)
      END
```

APÊNDICE E

CRITÉRIO PARA RECUPERAÇÃO DOS 25 GRUPOS ORIGINAIS

Sejam M o número de macrogrupos considerados. O ajustamento conduzirá a M valores de X_G , que são os fatores de ajustamento para as seções de choque de macrogrupo definidas na equação (VI.1).

É nosso objetivo obter, a partir do conjunto de valores X_G , os fatores de ajustamento para a estrutura original de grupos do HETAIRE^(5,10) (25 grupos), com os quais tomar-se-á possível ajustar as seções de choque multigrupo da biblioteca de dados do sistema CARNAVAL II⁽⁵⁾.

Conforme referido na seção VI.3 é desejável que isto seja feito de tal forma que obtenhamos uma curva suave para estes fatores, sem descontinuidades entre os macrogrupos de energia vizinhos.

O procedimento mostrado aqui é baseado em critérios apresentados por Pendlebury⁽⁵²⁾.

Se \bar{g} a energia média em um grupo g , os fatores $x(\bar{g})$ devem ser calculados a partir de uma função contínua em energia. Utilizando-se uma curva do 2º grau em E , dentro de cada macrogrupo G , podemos ter uma curva contínua e que tenha ainda derivada contínua entre macrogrupos vizinhos. Assim sendo, consideremos a equação:

$$x(E) = a_G + b_G E + c_G E^2 \text{ para } E \in G \quad (\text{E.1})$$

Sendo \bar{g} a energia média no grupo g , esta equação deve ser resolvida para os grupos g contidos em um macrogrupo G .

Obviamente necessitamos primeiramente determinar os coeficientes a_G , b_G e c_G . Se um total de M macrogrupos são envolvidos, há necessidade de determinar M valores de cada um dos coeficientes a_G , b_G e c_G e portanto necessita-se de $3M$ equações para determiná-los.

Considerando $E = \bar{g}$, temos inicialmente um número M de equações do tipo:

$$X_G \sigma_G = \sum_g x(\bar{g}) \sigma_g \phi'_g \quad (\text{E.2})$$

sendo que para cada macrogrupo G , temos que:

$$\sum_{g \in G} \phi'_g = 1$$

Substituindo a equação (E.1) em \bar{g} na equação (E.2), temos então para cada macrogrupo G as equações:

$$X_G \sigma_G = a_G \sum_g \sigma_g \phi'_g + b_G \sum_g \bar{g} \sigma_g \phi'_g + c_G \sum_g \bar{g}^2 \sigma_g \phi'_g \quad (\text{E.3})$$

Considerando que sejam contínuas a função e sua derivada na fronteira entre dois macrogrupos vizinhos, podemos obter um número de $2M-2$ equações, a partir da equação (E.1). Por

tanto:

$$a_G + b_G E + c_G E^2 = a_{G+1} + b_{G+1} E + c_{G+1} E^2 \quad (E.4)$$

e

$$b_G + 2c_G E = b_{G+1} + 2c_{G+1} E \quad (E.5)$$

para $G = 1, 2, \dots, M-1$

Os valores de E para as equações (E.4) e (E.5) são os valores de energia que limitam os macrogrupos vizinhos G e $G+1$.

Mais 2 equações são necessárias para a determinação dos coeficientes. Poderíamos considerar que os valores de $x(\bar{g})$ para o primeiro e o último grupo de energia poderiam ser fixados previamente. Assim:

$$\text{para } G = 1 \text{ e } g = 1, \quad x(\bar{g}) = \alpha$$

e

$$\text{para } G = M \text{ e } g = 25, \quad x(\bar{g}) = \theta$$

A aplicação dos valores acima na equação (E.1) em \bar{g} nos fornece as duas equações complementares.

O valor $\theta = 0$ é razoável, já que não é de interesse o valor do ajuste do 25º grupo, porém α deve ser estimado mais criteriosamente.

Um modo razoável de determinar α é considerar mínima a soma dos quadrados dos $x(\bar{g})$ para todos os grupos g contidos no macrogrupo $G = 1$. Assim procedendo, podemos considerar que:

$$\alpha = x(\bar{g}) \Big|_{\substack{G=1 \\ g=1}} = \frac{\phi'_g \sigma_g \sigma_G X_G}{\sum_{g \in G=1} (\phi'_g \sigma_g)^2} \quad (E.6)$$

Um procedimento idêntico pode ser utilizado para a determinação de um valor mais criterioso para θ , caso seja desejado.

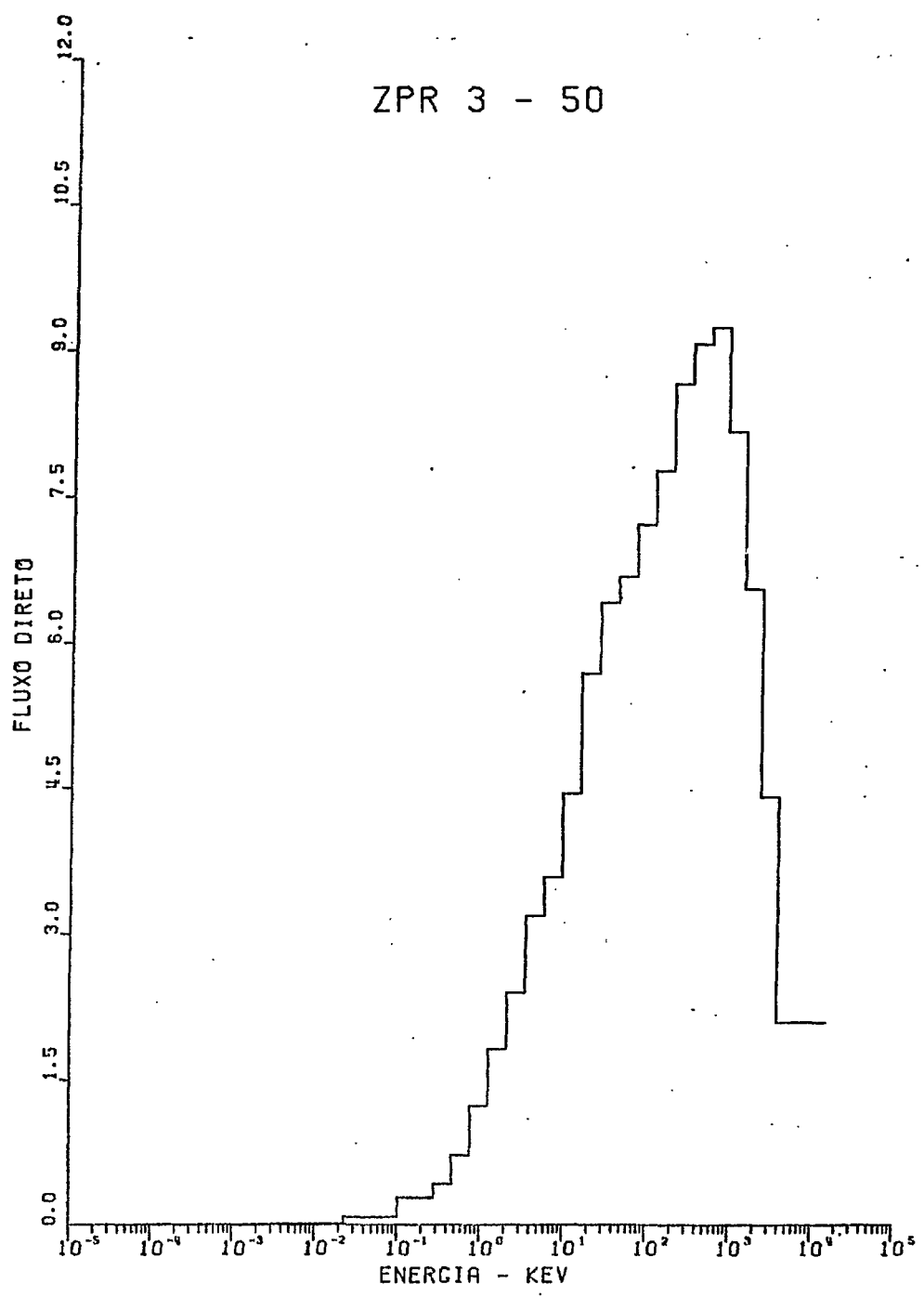
Uma vez calculados os M coeficientes a_G , b_G e c_G , os valores de $x(\bar{g})$ podem ser determinados a partir da equação (E.1) em \bar{g} .

APENDICE F

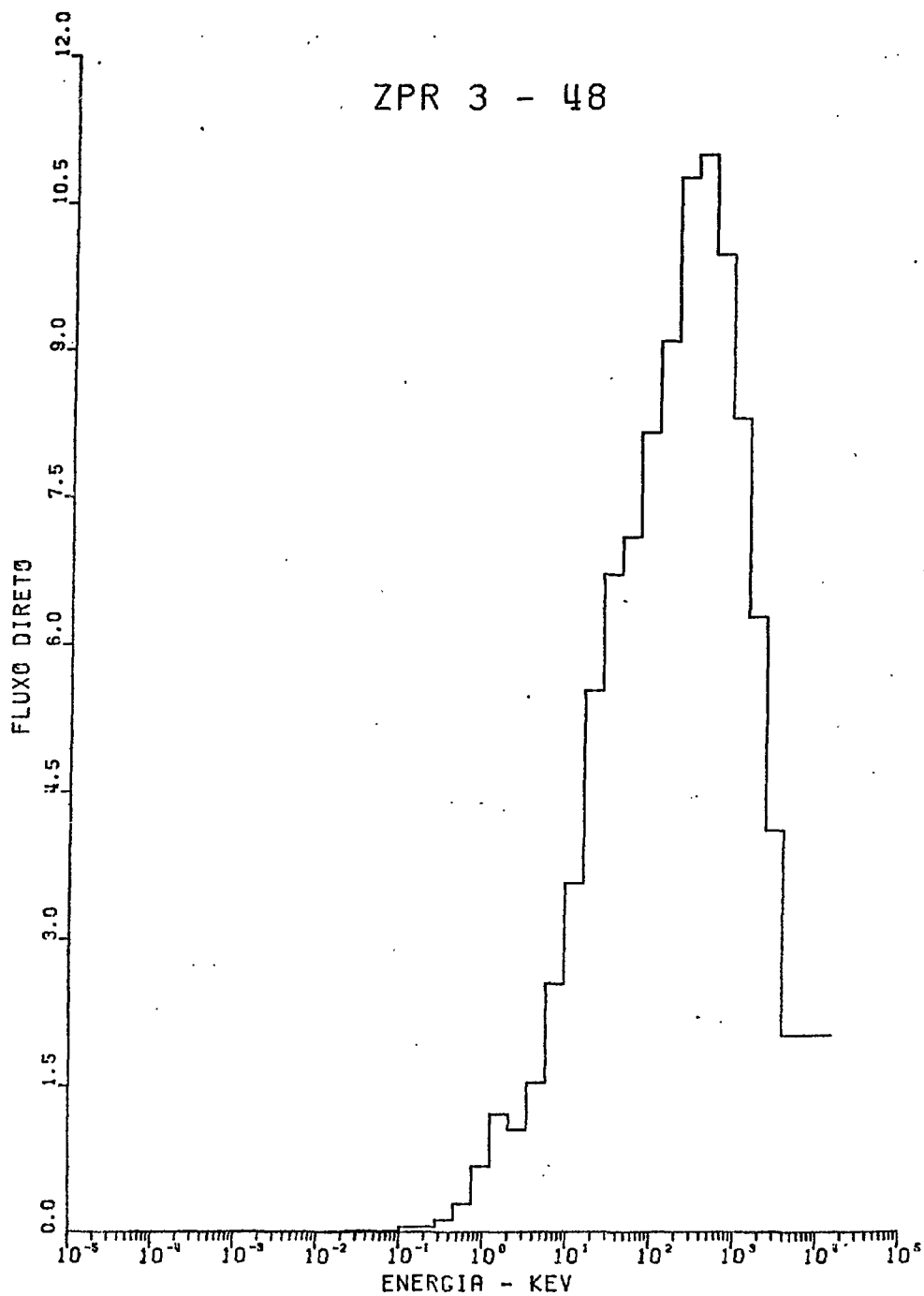
ESPECTROS DAS MONTAGENS CRÍTICAS CONSIDERADAS

Nas páginas seguintes encontram-se os espectros das montagens críticas utilizadas nas análises de sensibilidade.

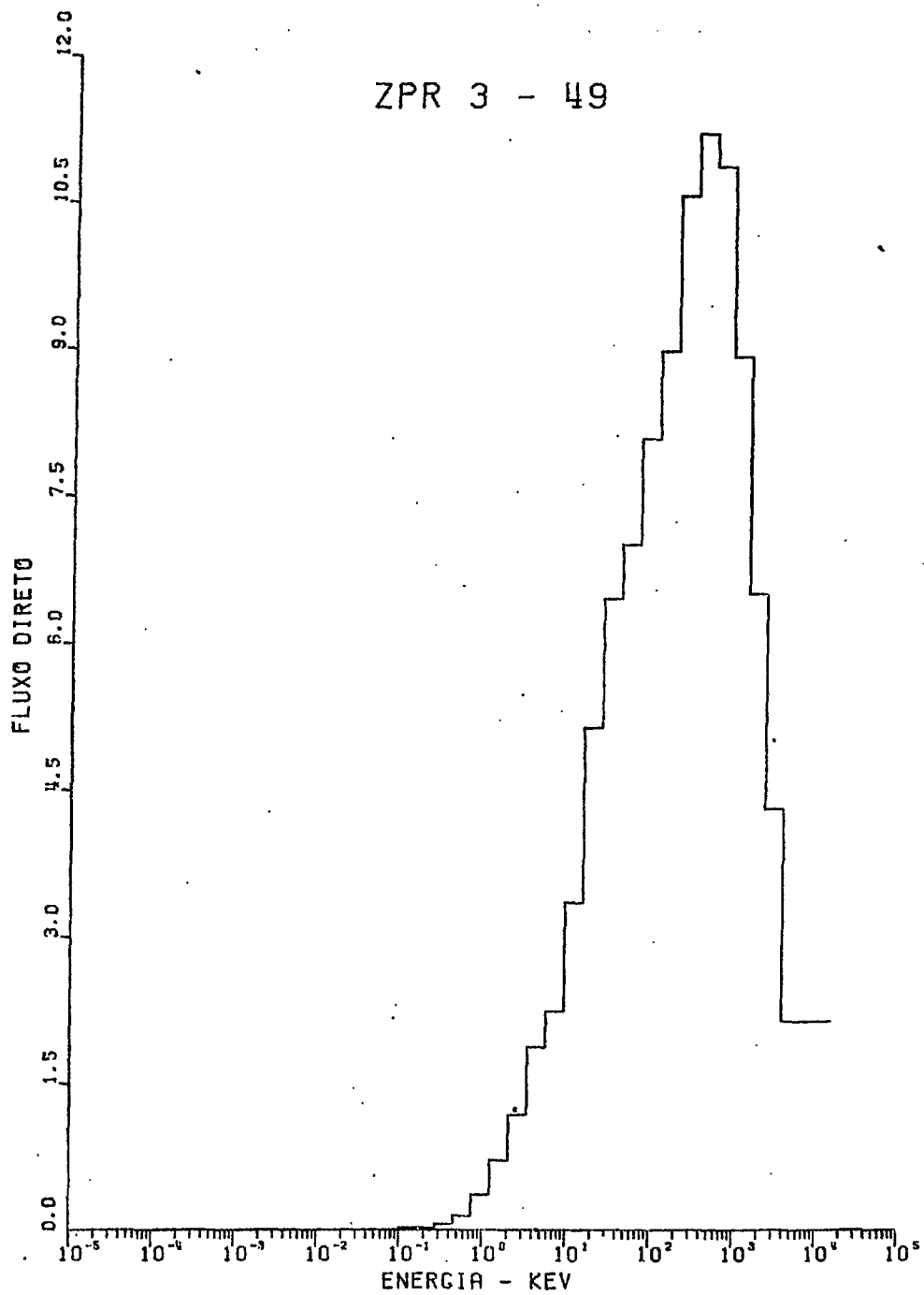
ZPR 3 - 50



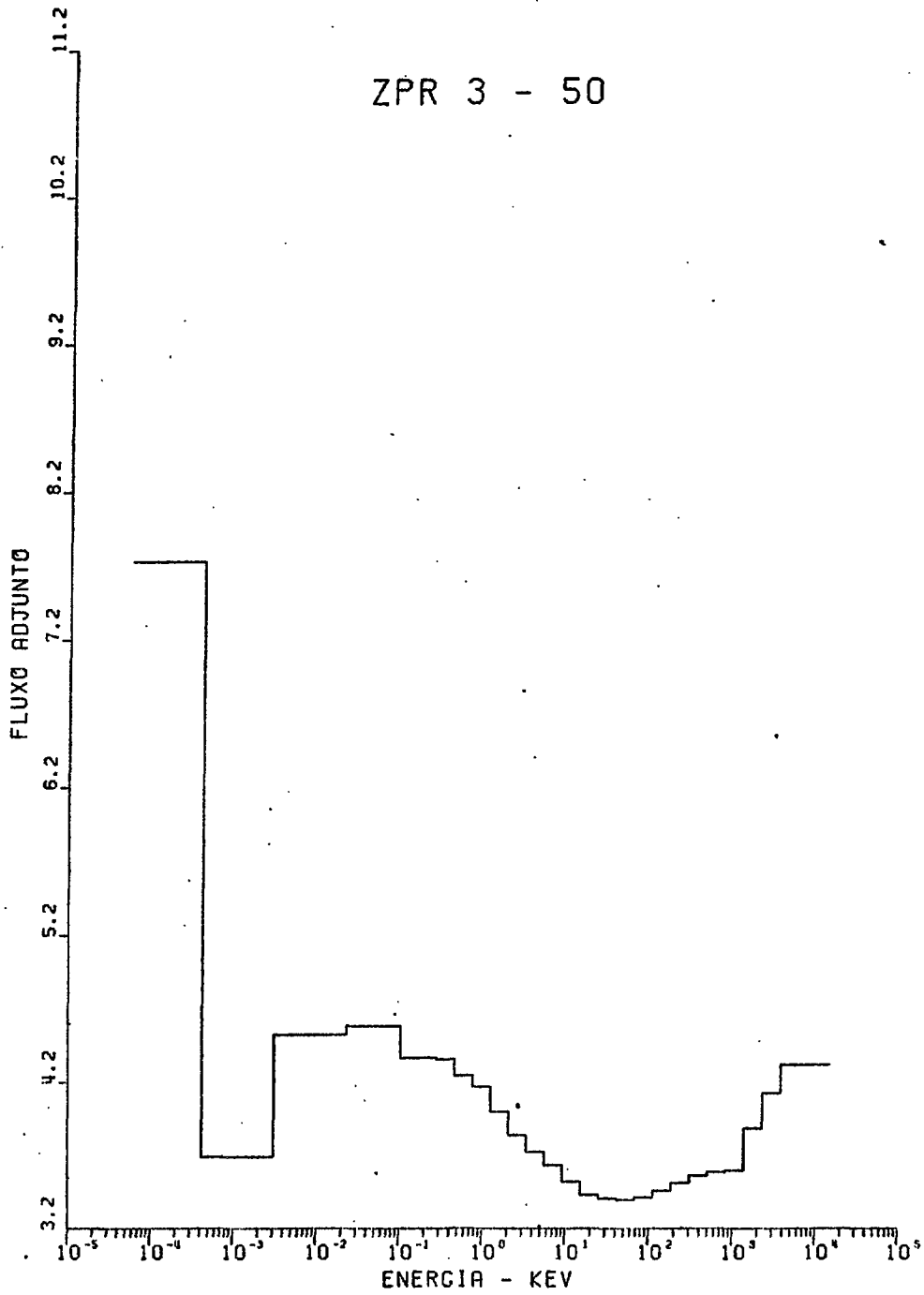
ZPR 3 - 48



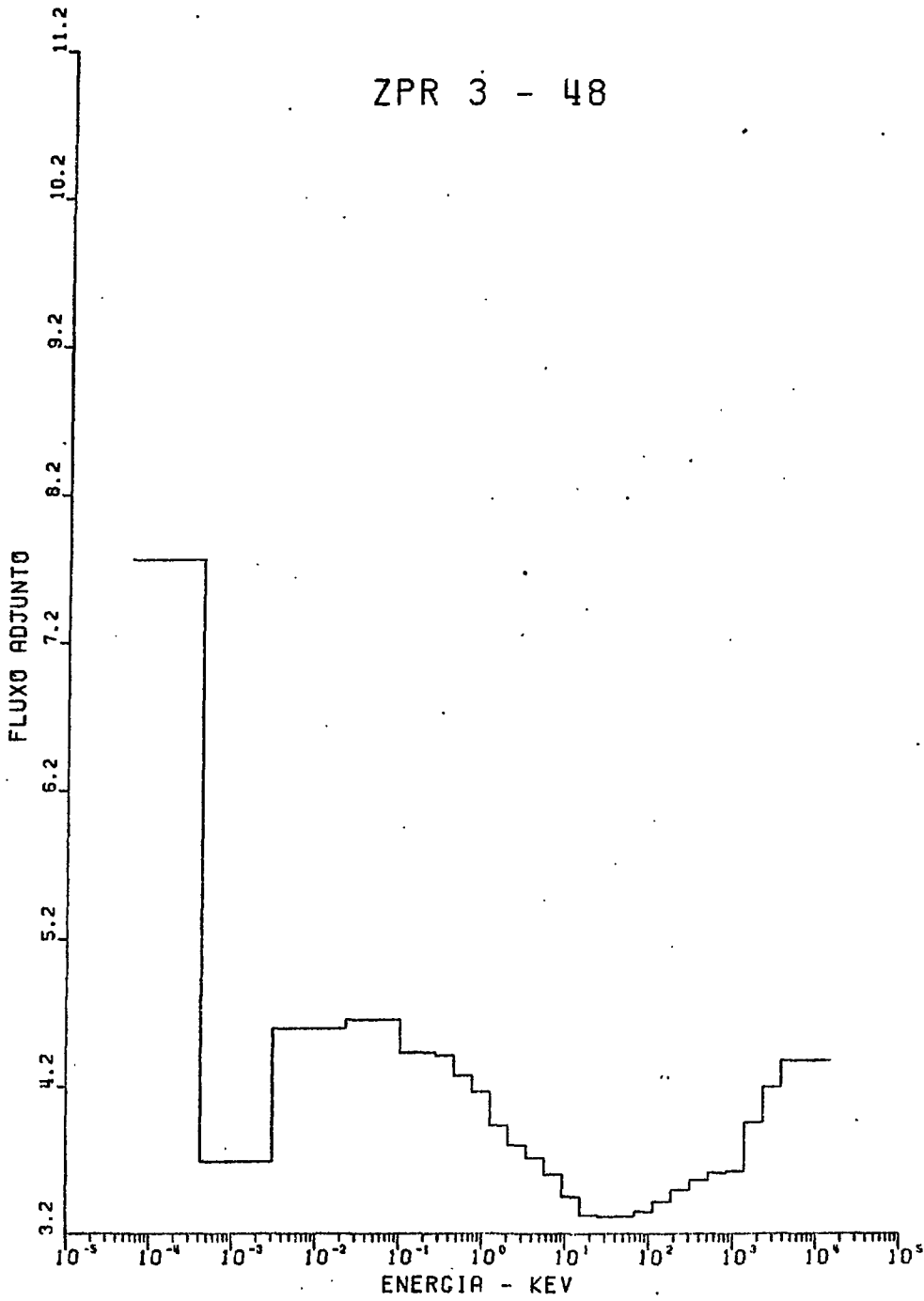
ZPR 3 - 49



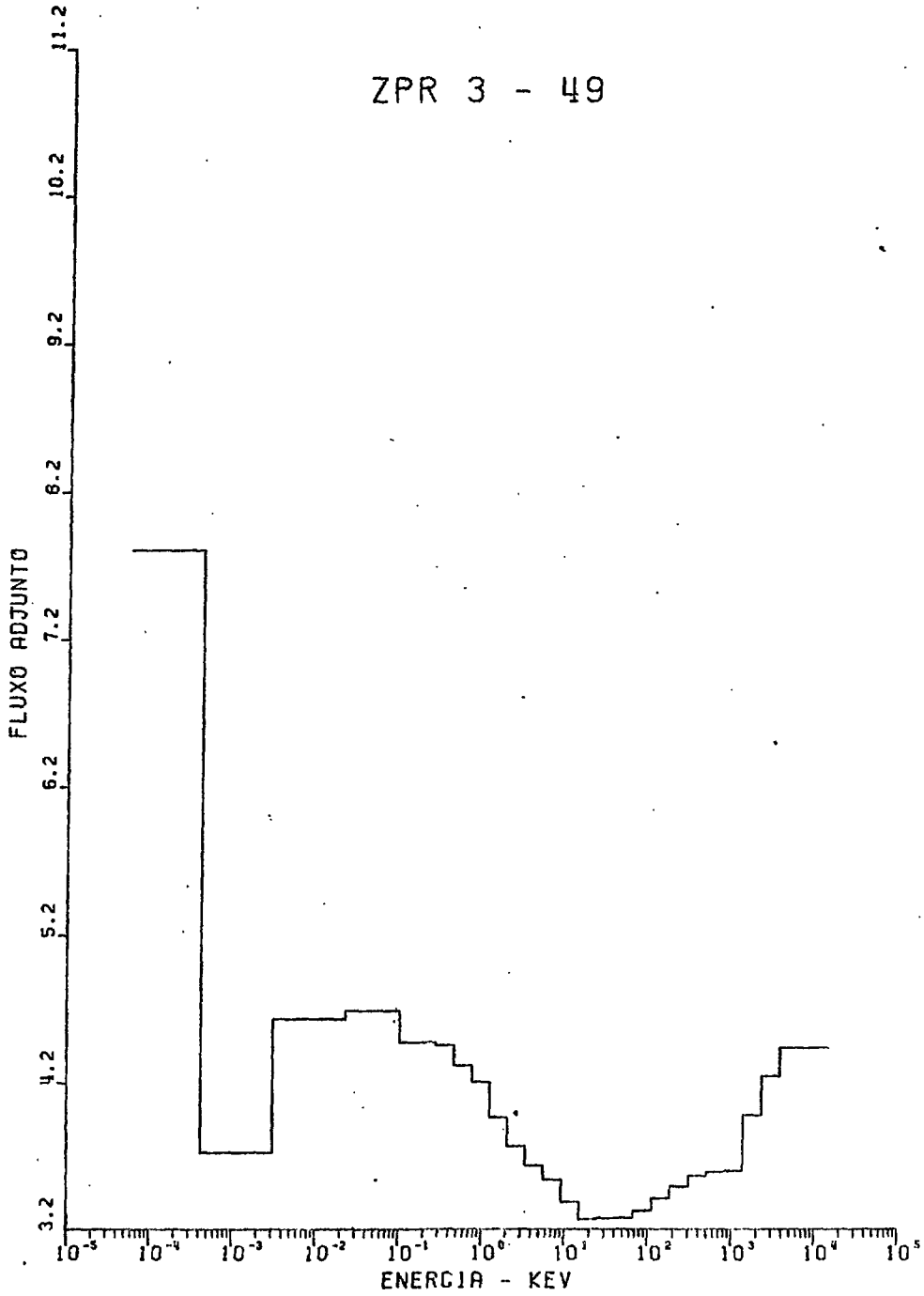
ZPR 3 - 50



ZPR 3 - 48



ZPR 3 - 49



BIBLIOGRAFIA

1. BASTOS, Heloisa F.B.N. - Estudo Metodológico do Ajuste de Seções de Choque Multigrupo para Reatores Rápidos, Utilizando Parâmetros Integrais. Coordenação dos Programas de Pós-Graduação de Engenharia da Universidade Federal do Rio de Janeiro, Tese de M.Sc., 1979.
2. BARRÉ, J.Y. - Influence des Incertitudes dans les Données Neutroniques sur Quelques Paramètres Caractéristiques d'un Reacteur a Neutrons Rapides. Note Interne PNR/SETR R. 026, Cadarache, Mai 1968.
3. BARRÉ, J.Y. et RAVIER, J. - Imprecisions des Paramètres Caractéristiques d'un Reacteur Rapide de Puissance Dues Aux Incertitudes Actuelles Concernant les Données Neutroniques: Leur Évaluation, et Leur Diminution à Partir des Expériences Critiques (SM-101/58). Proceedings of a Symposium, KALRSRUHE, v.1, 1967, p.205.
4. ABAGYAN, L.P. et al. - Group Constants for Nuclear Reactor Calculations. Consultants Bureau N.Y., 1964.
5. CHAUDAT, M. - Formulário CARNAVAL II (Código HETAIRE). Nota Técnica DIPRO/IEN/GN 3/76, NUCLEBRÁS/IEN.
6. HUMMEL, H.H. and STACEY, Jr., W.M. - Sensitivity of a Fast Critical Assembly to Uncertainties in Input Data Determined by Perturbation Theory - Nucl. Sci. Eng.,

54, p. 35-46, 1974.

7. BARRÉ, J.Y., et al. - Lessons Drawn from Integral Experiments on a Set of Multigroup Cross Sections. The Physics of Fast Reactor Operation and Design, London, BNES (1969), p. 165.
8. BARRÉ, J.Y., et al. - Improvements of the Predicted Characteristics for Fast Power Reactor from Integral Experiments: Cadarache Version III Multigroup Cross Section Set. Int. Symp. on Phys. of Fast Reactor (Proceedings), Oct. 73, v.3, p. 1207.
9. STACEY, Jr., W.M. and REGIS, J.R. - VARI-1D: A One - Dimensional Variational Sensitivity Code, ANL (1973).
10. KHAIRALLAH, A. et RECOLIN, J. - Specifications du Code HETAIRE - CARNAVAL II. Note Interne DRE/SPNR/75/007/ /AK/JR/MB, Cadarache, 1976.
11. BORE, C. et al. - Resolution de l'Equation Multigroupe de la Diffusion dans Une Geometrie a Une Dimension et Calculs Annexes. Code MUDE, Rapport C.E.A., R - 2923, 1965.
12. WEINBERG, A. - American Journal of Physics, 20, 7 (1952).
13. MOORHEAD, T. - The effects of Errors in Cross Section Data on the Calculations for a Large Dilute Fast Reactor. International Atomic Energy Seminar on the Physics

of Fast and Intermediate Reactors. Vienna, August
(1961).

14. MENEGHETTI, D. - Introductory Fast Reactor Physics Analysis.
ANL - 6809, Argonne National Laboratory (1963).
15. USACHEV, L.N. - Perturbation Theory for the Breeding Ratio
and for Other Number Ratios Pertaining to Various
Reactor Processes. Journal of Nuclear Energy, Parts
A/B, v. 18, p. 571 - 583, (1964).
16. GANDINI, A. - A Generalized Perturbation Method for Bi-Li-
near Functionals of the Real and Adjoint Neutron
Fluxes. Journal of Nuclear Energy, v. 21, p. 755-765,
(1967).
17. HANSEN, G.E. and SANDMEIER, H. A. - The Effect of Basic
Neutron Reaction Cross Sections of Nitrogen (n, n'),
($n, 2n$), (n, γ), (n, p), and (n, α) on High Energy Neutron
Penetration in Air. LA-3810, Los Alamos Scientific
Laboratory (1967).
18. STRAKER, E.A. - Sensitivity of Neutron Transport in Oxygen
to Various Cross Section Sets. ORNL - TM-2252 (1968).
19. PREEG, W.E. - Flux Sensitivity to Cross Section Data for
Iron and Oxygen. Doctoral Thesis, Columbia University
(1970).

20. CECCHINI, G.P. and SALVATORES, M. - Advances in Generalized Perturbation Theory - Nuc. Sci. Eng., 46, p. 304-320, (1971).
21. STACEY, Jr., W.M. - Variational Estimates of Reactivity Worths and Reaction Rate Ratios in Critical Nuclear Reactors. Nuc. Sci. Eng., 48, p. 444-458, (1972).
22. CORCUERA, R.P. - Sensibilite du Spectre, des Taux de Reaction et d'Autres Parametres Integraux a la Matrice Inelastique de l'Uranium 238. Note Technique n° 72/32 R.P.C./ES, S.E.C.P.R., (1972).
23. BARTINE, D.E., et al. - General Sensitivity Theory for Radiation Transport. ORNL-TM-4110, March (1973).
24. OBLow, E.M. - Reactor Cross-Section Sensitivity Studies Using Transport Theory. ORNL-TM-4437, April (1974).
25. HARRIS, D.R. et al. - Consistency among Differential Nuclear Data and Integral Observations: The ALVIN Code for Data Adjustment, for Sensitivity Calculations, and for Identification of Inconsistent Data. LA-5987, Los Alamos Scientific Laboratory (1975).
26. WEISBIN, C.R. et al. - Application of FORSS Sensitivity and Uncertainty Methodology to Fast Reactor Benchmark Analysis. ORNL/TM-5563, (1976).

27. GREENSPAN, E. - Perturbation Theory and Importance Functions in Integral Transport Formulations. Nuc. Sci. Eng., 61, p. 170-180, (1976).
28. STACEY, Jr., W.M. - Variational Estimates and Generalized Perturbation Theory for the Ratios of Linear and Bilinear Functionals. J. Math. Phys. 13, 1119 (1972).
29. STACEY, Jr., W.M. - Variational Methods in Nuclear Reactor Physics. Nuclear Science and Technology, v.10, Academic Press, (1974).
30. POMRANING, G.C. - Variational Principle for Eigenvalue Equations. J. Math. Phys., v.8, p. 149, (1967).
31. LEWINS, J. - A Variational Principle for Ratios in Critical Systems. J. Nucl. Energy, Part A/B, v. 20, p. 141, (1966).
32. LEWINS, J. - Development in Perturbation Theory. Advan. Nucl. Sci. Technol., v.4, p.309, (1968).
33. BROOMFIELD, A.M. et al. - ZPR-3 Assemblies 48, 48A, and 48B: The Study of a Dilute Plutonium - fueled Assembly and Its Variants. ANL-7759, December 1970, p.19.
34. ZPR-3-49 Critical Assembly. Reactor Development Program Progress Report. ANL-7357, July 1967, p.62.
35. ZPR-3-50 Critical Assembly. Reactor Development Program

Progress Report. ANL - 7371, August 1967, p. 60.

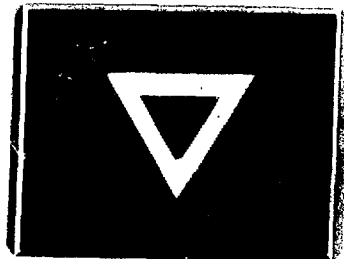
36. ENDF - 202 Cross Section Evaluation Working Group Benchmark Specifications, BNL-19302 (ENDF-202), November 1974.
37. FILLMORE, F.L. et al. - Comparison of Analysis of Fast Critical Assemblies Using Several Cross Section Data Sets and Different Cross Section Processing Codes. The Physics of Fast Reactor Operation and Design, London, BNES (1969), paper 1.12, p. 141.
38. HARDIE, R.W. et al. - An Analysis of Selected Fast Critical Assemblies Using ENDF/B-IV Neutron Cross Sections. Nuc. Sci. Eng., 57, p. 222-238, July 1975.
39. COLLINS, P.J. and LINEBERRY, M.J. - The Use of Cross Section Sensitivities in the Analysis of Fast Reactor Integral Parameters. Proc. Advances in Reactor Physics, Gatlinburg, CONF-780401 (1978).
40. AGHINA, L.O.B. - Ajuste de Dados de Base por Meio de Medidas de Parâmetros Integrais. Nota Técnica 001/77, Nuclebrás/IEN.
41. BARRÉ, J.Y. et BOUCHARD, J. - Rôle Complémentaire des Expériences Intégrales par Rapport aux Mesures Différentielles pour un Projet de Réacteur à Neutrons Rapides. Cas des Isotopes du Plutonium. (IAEA-CN-26/73). Second International Conference on Nuclear Data for Reactors, Helsinki (1970), p. 465.

42. DAVEY, W.G. and REDMAN, W.C. - Techniques in Fast Reactor Critical Experiments. ANS-USAEC MONOGRAPH, 1970.
43. EDELMANN, M. et al. - Physics Measurements in the Sneak Facility on Steam - Cooled Fast Reactor Systems with Uranium and Plutonium Fuel. The Physics of Fast Reactor Operation and Design, London, BNES (1969), paper 1.11, p. 113.
44. CECCHINI, G. and GANDINI, A. et al. - Comparison Between Experimental and Theoretical Integral Data on Fast Critical Facilities. CALI, A. Program for Generating "Effective" Nuclear Group Constants by a Correlation Method. ANL-7320, October 1966, p. 107.
45. BOHN, E.M., OLSON, I. K. and ROBINSON, W.R. - A Correlation Study of the Central Worth Discrepancy. TRANS. AM. NUCL. SOC., 15 (1972), p. 947.
46. EIDELMAN, F.; SOTO, J.B. e ROSIER, C.J. - Sistema Modular de Códigos para Cálculo de Reatores Rápidos e Ajuste de Seções de Choque. Nota Técnica nº 009/77, NUCLEBRÁS-IEN, 1977, Anexo III, p. 25.
47. JUST, L.C. et al. - The System Aspects and Interface Data Sets of The Argonne Reactor Computation (ARC) System. ANL - 7711, April 1971.
48. MCKNIGHT, R.D. - Sensitivity Analysis for the Advanced Fuels Program Carbide Benchmark Critical Assembly.

CONF-780401 (1978).

49. TAKANO, H. et al. - JAERI Fast Reactor Group Constants Set, Version II. JAERI-1255 (1978).
50. MITANI, H. and KUROI, H. - Adjustment of Group Cross Sections by Means of Integral Data, (II) Numerical Study. Journal of Nuclear Science and Technology, 9(11), p. 642-657 (1972).
51. CHAUDAT, M. Programa de Física de Reatores Rápidos no CEA. Nota Técnica DIPRO/IEN/GN 4/76, NUCLEBRÁS/IEN.
52. HEMMENT, P.C.E. and PENDLEBURY, E.D. - The optimisation of Neutron Cross Section Data Adjustments to Give Agreement with Experimental Critical Sizes. ANL 7320, p. 88-106, (1966).

J - 037



83.03.15

A.D 83.01

