

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

MODELO DE CINÉTICA PONTUAL EM REATORES NUCLEARES
CONSIDERANDO VARIAÇÃO NA COMPOSIÇÃO DO COMBUSTÍVEL E DUAS
ESCALAS DE TEMPO

por

Tomás Mallmann Paganin

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Outubro de 2018

MODELO DE CINÉTICA PONTUAL EM REATORES NUCLEARES
CONSIDERANDO VARIAÇÃO NA COMPOSIÇÃO DO COMBUSTÍVEL E DUAS
ESCALAS DE TEMPO

por

Tomás Mallmann Paganin
Engenheiro Mecânico

Dissertação submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann

Aprovada por:

Prof. Dr. Antonio Carlos Marques Alvim COPPE/UFRJ

Prof. Dr. Marco Túlio Vilhena PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Luiz Rocha PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Eduardo André Perondi
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 5 de Outubro de 2018

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos meus pais Álvaro e Simone, pelo amor incondicional, carinho e paciência que me deram não somente durante a realização desta tese, mas no decorrer de toda a minha vida;

Agradeço ao professor Bardo Ernst Josef Bodmann pela dedicação, paciência, confiança e amizade durante a orientação desta dissertação;

Agradeço ao Luiz Felipe Fracasso Chaves Barcellos, cuja ajuda foi indispensável na conclusão deste trabalho.

Agradeço à Mel Guirro pela companhia e apoio nesta etapa de minha vida.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro para a elaboração deste trabalho.

E agradeço a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

A presente discussão é uma extensão de um novo modelo de cinética pontual de nêutrons recentemente desenvolvido, onde a reatividade é decomposta em termos de contribuição de curtas e longas escalas de tempo. A curta escala condiz ao controle operacional do reator, enquanto na longa escala apresentam-se os efeitos da alteração da composição química do combustível nuclear, como consequência do processo de fissão e captura de nêutrons. A evolução apresentada neste trabalho consiste em não só a consideração dos efeitos dos principais venenos de nêutrons como também uma primeira análise dos efeitos de alguns transurânicos, ou seja, Neptúncio-239 e o Plutônio-239. Em virtude da variação isotópica do combustível, o modelo consiste em um sistema de equações não-lineares. O sistema é resolvido através do método da decomposição de Adomian, que expande a solução em uma série infinita, cujas contribuições são obtidas pela solução de sistemas recursivos em que o termo não linear é tratado como termo fonte. O termo fonte é calculado pelos polinômios de Adomian a partir das soluções obtidas nas recursões anteriores. É proposto também abordagens para diagonalizar a matriz linear e reduzir problemas de rigidez existentes, responsáveis pela grande instabilidade no cálculo computacional. Devido a esta instabilidade, utilizaram parâmetros abaixo das condições esperadas para simulações de reatores nucleares, onde o algoritmo apresenta estabilidade no atual estado de desenvolvimento. São apresentados diversos casos de estudo, analisando o comportamento não-linear de um reator nuclear, sujeito à variação da concentração de combustível inicial, desligando e em operação em longa escala de tempo, utilizando combustíveis novos e usados. As contribuições das soluções são analisadas para averiguar convergência da série. O termo residual do sistema de equações é calculado e apresenta-se ordens de grandeza inferior ao sistema de equações (1%).

Palavras-chave: Cinética pontual; Decomposição de Adomian; Decomposição da reatividade; Venenos de nêutrons, Transurânicos.

ABSTRACT

The present discussion is an extension of a new model recently developed of neutrons point kinetics, where the reactivity is decomposed in terms of short and long time scales. The short scale corresponds to the operational control of the reactor, while the long scale corresponds to the effects of the chemical composition variation of the nuclear fuel as a consequence of the fission and neutron capture processes. The improvement presented in this work consists in not only considering the effects of the main neutron poisons but also a first analysis of the effects of some transuranium, Neptunium-239 and Plutonium-239 in this case. Due to the isotope variation of the fuel, the model consists of a system of nonlinear equations. The system is solved through the Adomian decomposition method, which expands the solution into an infinite series, whose contributions are obtained by the solution of recursive systems in which the nonlinear term is treated as the source term. The source term is calculated by the Adomian polynomials from the solutions obtained in previous recursions. Approaches to diagonalize the linear matrix are proposed in order to reduce existing stiffness problems, responsible for the great instability in computational algorithms. Due to this instability, parameters below the expected conditions for simulations of nuclear reactors were used, where the algorithm presents stability in the current state of development. Several case studies are presented, analyzing the nonlinear behavior of a nuclear reactor with different reactivities, subject to initial fuel concentration variation and using new and old fuels. The contributions of the solutions are analyzed to ascertain convergence of the series. The residual term was obtained and presented to be lower by several orders of magnitude compared to the system studied (around 1%).

Keywords: Point kinetics; Adomian decomposition; Decomposition of reactivity; Neutron poisons; Transuranium.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	6
2.1	Teoria de difusão de nêutrons	6
2.1.1	Difusão de nêutrons	6
2.1.2	Seções de choque	7
2.1.3	Modelo multigrupo de energia	13
2.2	Cinética de reatores	15
2.3	Nêutrons atrasados	16
2.4	Venenos do reator	19
2.4.1	Xenônio	20
2.4.2	Samário	20
2.5	Urânio	21
2.6	Transurânicos	22
2.7	Ciclo de vida do combustível nuclear	25
3	MODELAGEM E METODOLOGIA APLICADA	27
3.1	Cinética pontual considerando venenos e transurânicos	27
3.2	Modelo	32
3.3	Metodologia Aplicada	32
3.3.1	Método de Decomposição de Adomian	35
3.3.2	Discretização do tempo	39
3.3.3	Manipulação matricial	39
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	42
4.1	Combustível novo	42
4.1.1	Caso A: Reator desligando	42
4.1.2	Caso B: Reator em operação	48
4.2	Combustível usado	63

4.3	Análise do termo residual e estabilidade do código	67
4.4	Teste de independência da resolução temporal	72
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	74
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	76
APÊNDICE A	Resultados complementares de cinética pontual . . .	80
ANEXO I	Dedução da equação de cinética pontual a partir da equação de difusão de nêutrons	89
ANEXO II	Método de Decomposição de Adomian	92

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Fontes de energia e suas contribuições na matriz energética Alemã em 2017 [Burguer, 2018].	1
Figura 2.1	Seções de choque microscópicas do Xenônio-135, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].	9
Figura 2.2	Seções de choque microscópicas do Samário-149, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].	10
Figura 2.3	Seções de choque microscópicas do Urânio-238, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].	11
Figura 2.4	Seções de choque microscópicas do Urânio-235, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].	12
Figura 2.5	Seções de choque microscópicas do Plutônio-239, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].	12
Figura 2.6	Espectro energético dos nêutrons presentes em reatores térmicos e rápidos, adaptado de [DOE, 1993].	13
Figura 2.7	Esquema multigrupo de energia.	14
Figura 2.8	Distribuição percentual dos produtos de fissão do Plutônio-239 e Urânio-235, adaptado de [Reuss, 2008].	17
Figura 2.9	Cadeia de geração de transurânicos da cadeia do Urânio-235 e Urânio-238, adaptado de [Reuss, 2008].	23
Figura 2.10	Ciclo do combustível nuclear [Espinosa, 2016].	25
Figura 2.11	Diagrama de rearranjo dos elementos de combustível em reatores com mais de um ciclo de combustível, adaptado de [Reuss, 2008].	26
Figura 4.1	Densidade de nêutrons com $\rho_c = -0,0001$	43
Figura 4.2	Concentração de precursores com $\rho_c = -0,0001$	44
Figura 4.3	Concentração do Xenônio-135 com $\rho_c = -0,0001$	45
Figura 4.4	Concentração de Samário-149 com $\rho_c = -0,0001$	45
Figura 4.5	Concentração de Urânio-235 com $\rho_c = -0,0001$	46
Figura 4.6	Concentração de Neptúlio-239 com $\rho_c = -0,0001$	47

Figura 4.7	Concentração de Plutônio-239 com $\rho_c = -0,0001$	48
Figura 4.8	Densidade de nêutrons com $\rho_c = 0$	51
Figura 4.9	Concentração de precursores com $\rho_c = 0$	52
Figura 4.10	Concentração de Xenônio-135 com $\rho_c = 0$	54
Figura 4.11	Concentração de Samário-149 com $\rho_c = 0$	55
Figura 4.12	Concentração de Urânio-235 com $\rho_c = 0$	56
Figura 4.13	Concentração de Neptúncio-239 com $\rho_c = 0$	57
Figura 4.14	Concentração de Plutônio-239 com $\rho_c = 0$	58
Figura 4.15	Densidade de nêutrons variando as condições iniciais, com $\rho_c = 0$	62
Figura 4.16	Densidade de nêutrons com elementos usados e $\rho_c = 0$	64
Figura 4.17	Concentração de precursores com elementos usados e $\rho_c = 0$	64
Figura 4.18	Concentração de Xenônio-135 com elementos usados e $\rho_c = 0$	65
Figura 4.19	Concentração de Samário-149 com elementos usados e $\rho_c = 0$	65
Figura 4.20	Concentração de Urânio-235 com elementos usados e $\rho_c = 0$	66
Figura 4.21	Concentração de Neptúncio-239 com elementos usados e $\rho_c = 0$	66
Figura 4.22	Concentração de Plutônio-239 com elementos usados e $\rho_c = 0$	67
Figura 4.23	Termo residual calculado em $t=100h$	71
Figura 4.24	Densidade de nêutrons (a) e tempo de processamento (b) em função do número de pontos por hora com $\rho_c = 0$, $C_U =$ $10^{18}[cm^{-3}]$ e $t = 100[h]$	73
Figura A.1	Concentração de Iodo-135 com combustível novo e $\rho_c = -0,0001$	80
Figura A.2	Concentração de Promécio-149 com combustível novo e $\rho_c =$ $-0,0001$	81
Figura A.3	Concentração de Iodo-135 com combustível novo e $\rho_c = 0$	81
Figura A.4	Concentração de Promécio-149 com combustível novo e $\rho_c = 0$	82
Figura A.5	Densidade de nêutrons com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$	83
Figura A.6	Concentração de precursores com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$	83
Figura A.7	Concentração de Iodo-135 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$	84
Figura A.8	Concentração de Xenônio-135 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$	84
Figura A.9	Concentração de Promécio-149 com elementos usados e $\rho_c =$ $-0,0001$	85

Figura A.10	Concentração de Samário-149 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.	85
Figura A.11	Concentração de Urânio-235 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.	86
Figura A.12	Concentração de Neptúncio-239 com elementos usados e $\rho_c =$ $-0,0001$	86
Figura A.13	Concentração de Plutônio-239 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.	87
Figura A.14	Concentração de Iodo-135 com elementos usados e $\rho_c = 0$	87
Figura A.15	Concentração de Promécio-149 com elementos usados e $\rho_c = 0$. . .	88

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Grupos de precursores de nêutrons para Urânio-235 e Plutônio-239	18
Tabela 4.1	Variações das seções de choque macroscópicas de venenos e materiais físséis	60
Tabela 4.2	Norma das diferenças entre soluções sucessivas	69
Tabela 4.3	Norma das soluções em cada recursão	69
Tabela 4.4	Número de recursões utilizadas	72

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

PROMECC	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
CNPQ	Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico
MOX	Mixed Oxide
I-135	Elemento Iodo-135
Xe-135	Elemento Xenônio-135
Pm-149	Elemento Promécio-149
Sm-149	Elemento Samário-149
U-235	Elemento Urânio-235
U-238	Elemento Urânio-238
Np-239	Elemento Neptúncio-239
Pu-239	Elemento Plutônio-239

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

A	Matriz de entradas constantes
A_j^i	Polinômio de Adomian do nuclídeo i na recursão j para os termos não lineares
B_j^i	Polinômio de Adomian do nuclídeo i na recursão j para os termos lineares artificiais
C	Concentração de precursores de nêutrons atrasados [cm^{-3}]
C_I	Concentração do Iodo-135 [cm^{-3}]
C_{Xe}	Concentração do Xenônio-135 [cm^{-3}]
C_{Pm}	Concentração do Promécio-149 [cm^{-3}]
C_{Sm}	Concentração do Samário-149 [cm^{-3}]
C_U	Concentração do Urânio-235 [cm^{-3}]
$C_{U_{238}}$	Concentração do Urânio-238 [cm^{-3}]
$C_{U_{tot}}$	Concentração total dos átomos de Urânio [cm^{-3}]
C_{Np}	Concentração do Neptúnio-239 [cm^{-3}]
C_{Pu}	Concentração do Plutônio-239 [cm^{-3}]
D	Matriz diagonal dos autovalores
D	Coefficiente de difusão, [cm]
f	Funções não lineares
F_j	Vetor fonte aproximado pelos polinômios de Adomian na recursão j
J_x	Vetor densidade de corrente [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$]
k_{eff}	Coefficiente de multiplicação efetivo
N	Matriz dependente do tempo da parte não linear
n	Densidade de nêutrons [cm^{-3}]
O	Erro associado a aproximação da derivada por diferenças finitas [$\text{cm}^{-3} \text{h}^{-1}$]
P_j^i	Polinômio de Adomian do nuclídeo i na recursão j para os termos lineares
Q^{ext}	Fonte externa de nêutrons, [$\text{cm}^{-3} \text{h}^{-1}$]
r	Termo residual, [$\text{cm}^{-3} \text{h}^{-1}$]
t	Tempo, [h]
T	Periodo total de simulação [h]

v	Velocidade do nêutron [cm/h]
\bar{v}	Velocidade média do nêutron [cm/h]
I_{135}	Elemento Iodo-135
Xe_{135}	Elemento Xenônio-135
Pm_{149}	Elemento Promécio-149
Sm_{149}	Elemento Samário-149
U_{235}	Elemento Urânio-235
U_{238}	Elemento Urânio-238
Np_{239}	Elemento Neptúnio-239
Pu_{239}	Elemento Plutônio-239
\mathbf{V}	Matriz cujas colunas são autovetores da matriz \mathbf{A}
\mathbf{V}^{-1}	Matriz inversa dos autovetores
\mathbf{Y}	Vetor solução do sistema

Símbolos Gregos

$\bar{\beta}$	Fração de nêutrons atrasados
β_U	Fração total dos grupos de nêutrons atrasados para o Urânio-235
β_{Pu}	Fração total dos grupos de nêutrons atrasados para o Plutônio-239
ϵ	Enriquecimento de Urânio-235 no combustível
ϵ_{parada}	Critério de parada para as recursões do método
γ_I^i	Fração de geração do Iodo-135 pela fissão do elemento i
γ_{Xe}^i	Fração de geração do Iodo-135 pela fissão do elemento i
γ_{Pm}^i	Fração de geração do Iodo-135 pela fissão do elemento i
Λ	Tempo médio de geração entre o nascimento do nêutron e posterior absorção, [h]
λ	Constante de decaimento dos precursores de nêutrons, [h ⁻¹]
λ_I	Constante de decaimento do Iodo-135, [h ⁻¹]
λ_{Xe}	Constante de decaimento do Xenônio-135, [h ⁻¹]
λ_{Pm}	Constante de decaimento do Promécio-149, [h ⁻¹]
λ_{Np}	Constante de decaimento do Neptúnio-239, [h ⁻¹]
λ_{Sm}^*	Constante de decaimento fictício do Samário-149, [h ⁻¹]
λ_U^*	Constante de decaimento fictício do Urânio-235 [h ⁻¹]
λ_{Pu}^*	Constante de decaimento fictício do Plutônio-239 [h ⁻¹]

ν_i	Número médio de nêutrons produzidos na fissão do elemento i
ρ	Reatividade
ρ_c	Reatividade de escala de tempo curta
ρ_l	Reatividade de escala de tempo longa
ϕ	Fluxo escalar de nêutrons [$\text{cm}^{-2} \text{h}^{-1}$]
ϕ^*	Fluxo escalar adjunto de nêutrons [$\text{cm}^{-2} \text{h}^{-1}$]
σ_a^i	Seção de choque microscópica de absorção de nêutrons para o elemento i [cm^2]
σ_f^i	Seção de choque microscópica de fissão de nêutrons para o elemento i [cm^2]
σ_s^i	Seção de choque microscópica de espalhamento de nêutrons para o elemento i [cm^2]
Σ_a^i	Seção de choque macroscópica de absorção de nêutrons para o elemento i [cm^{-1}]
Σ_f^i	Seção de choque macroscópica de fissão de nêutrons para o elemento i [cm^{-1}]
Σ_s^i	Seção de choque macroscópica de espalhamento de nêutrons para o elemento i [cm^{-1}]
Σ_{tr}	Seção de choque macroscópica de transporte de nêutron [cm^{-1}]
χ_p	Espectro de fissão de nêutrons prontos
χ_d	Espectro de fissão de nêutrons atrasados

1 INTRODUÇÃO

Os reatores nucleares são fundamentais nas matrizes energéticas de países que usufruem desta fonte de energia. Um estudo realizado pelo instituto Fraunhofer Gesellschaft [Burguer, 2018], demonstrado na Figura 1.1, evidencia o consumo energético da Alemanha no ano de 2017, discretizando ainda as fontes de energia utilizadas e suas contribuições. Percebe-se que a energia nuclear tem uma contribuição significativa na matriz energética alemã. Em um longo período de operação com um mesmo ciclo de combustível, há a alteração da constituição do combustível, gerando diversos outros elementos que influenciam o comportamento dos reatores nucleares. Neste trabalho é analisada a cinética de reatores com a contribuição dos efeitos da variação da composição do combustível nuclear na reatividade. Como o presente trabalho demonstrará, a especificação explícita dos venenos de nêutrons e dos transurânicos torna o modelo não-linear e com escalas de tempo que diferem por mais ordens de grandeza que a cinética pontual tradicional. Se faz necessário então o estudo das contribuições tanto de curta escala de tempo quanto numa longa escala.

Produção de eletricidade na Alemanha em 2017

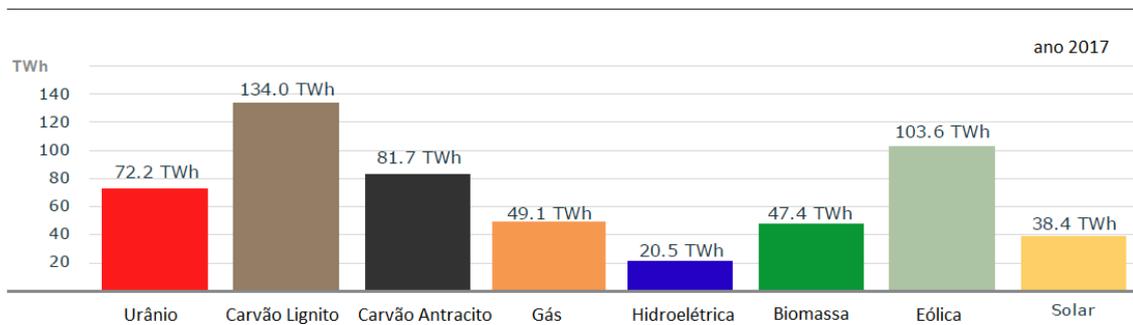


Figura 1.1 – Fontes de energia e suas contribuições na matriz energética Alemã em 2017 [Burguer, 2018].

A cinética pontual tradicional é um dos modelos matemáticos usualmente utilizados para simular transientes em reatores nucleares em curta escala de tempo. A partir de certas simplificações, ela busca prever o comportamento de reatores e avaliar sua segurança na operação, que ocorrem na ordem entre $10^{-1}s$ até 10^1s . Contudo ao decorrer do tempo, os efeitos relacionados à variação da composição química do combustível, que ocorrem na ordem de 10^3s à 10^6s e como consequência da absorção de fissão do material

presente no reator, começam a influenciar o sistema. A interação entre nêutrons e a matéria presente resulta em uma série de possíveis reações que culminam na geração de outros elementos, alterando as propriedades físicas gerais do reator, contribuindo negativamente na reatividade pela redução do combustível e geração de venenos, e positivamente com a geração de transurânicos. O modelo de cinética pontual considera que em pequenos períodos de tempo, pode-se considerar o combustível e as propriedades do reator constantes [Rydin, 2003], contudo esta hipótese não é mais válida quando se considera intervalos temporais maiores.

Em escala longa de tempo, os principais efeitos a serem considerados são os causados pela queima do combustível, a geração de elementos chamados de venenos ou transurânicos. Os venenos, resultado da fissão de elementos físeis, possuem alta capacidade de absorção de nêutrons e funcionam como elementos parasitários no reator, reduzindo sua reatividade. Os transurânicos, por sua vez, são elementos físeis ou férteis (que podem absorver mais nêutrons e gerar outros elementos físeis), resultantes da absorção de nêutrons por elementos pesados, que contribuem positivamente na reatividade e potência do reator. Venenos e transurânicos influenciam de maneiras contrárias dentro do reator, com proporções próprias devido suas propriedades físicas. No caso do venenos, consideram-se principalmente os elementos Xenônio-135 e Samário-149, enquanto no caso dos transurânicos, o principal considerado neste trabalho consiste no Plutônio-239 [Reuss, 2008].

O estudo de longa escala é importante para se avaliar a composição química do reator e os ciclos de operação utilizando determinado combustível. Diversos reatores utilizam combustíveis usados junto com elementos novos, buscando reaproveitar o material físsil ainda existente no material usado e tornar o fluxo de nêutrons dentro do reator mais uniforme. Contudo, há sempre a influência de elementos como o Samário-149, que é estável, que tende a se acumular no reator ao longo do tempo [DOE, 1993] e reduzir a eficiência do combustível. Outra consideração importante neste estudo é o aproveitamento do combustível já exaurido e no fim do seu ciclo para a geração de combustíveis recicláveis.

Diversos trabalhos estão presentes na literatura abordando o problema de cinética de reatores em curta escala. Para casos simples onde a reatividade é constante, obteve-se soluções analíticas [Aboander e Nahla, 2004; Li et al., 2010]. Para casos mais complexos, diversos métodos numéricos ou aproximações analíticas foram utilizados para se descrever

o comportamento de reatores nucleares. Basken e Lewins, 1996 e Aboander e Hamada, 2002 determinaram a reatividade transiente a partir da aproximação do fluxo de nêutrons por séries de potências. Ganopol, 2013 e Ceolin, 2014 por sua vez, utilizaram séries de Taylor e algoritmos de alta precisão. Nahla, 2011 estendeu a metodologia utilizando séries de potências contudo considerando também a realimentação da temperatura na reatividade, sendo posteriormente estendido para mais tipos de reatividade por Hamada, 2013. Schramm, 2016 também abordou cinética espacial bidimensional com séries de potências em microregiões, resolvendo a variável temporal pelo método de Euler. Outros trabalhos utilizaram de métodos analíticos para a determinação da reatividade e fluxo de nêutrons, como Petersen, 2011, Ceolin, 2010 e Seliverstov e Shvedov, 1998 a partir do método de transformadas integrais.

Espinosa, 2016 apresentou uma nova metodologia para se abordar cinética pontual e espacial unidimensional para se considerar tanto a operação do reator como a variação da composição do combustível, utilizando tanto a curta escala de tempo como a longa escala, montando um sistema de equações não-lineares e resolvendo-o pelo método de decomposição de Adomian [Adomian, 1988; 1994]. O presente trabalho apresenta uma extensão do modelo de cinética pontual com duas escalas de tempo desenvolvido por Espinosa, 2016. O modelo proposto neste trabalho consiste em um sistema de equações não-lineares acoplado para a densidade de nêutrons, precursores de nêutrons atrasados, cadeias de decaimento dos venenos, com origem nos produtos de fissão e para a cadeia de decaimento dos transurânicos com origem na absorção de nêutrons pelo Urânio-238, presente em grande quantidade no combustível nuclear. A reatividade neste modelo é decomposta em duas escalas, uma de curta duração, que compreende os efeitos de controle operacional do reator, associada ao modelo tradicional de cinética pontual, e uma de longa duração, relacionada aos efeitos de alteração de composição do material dentro do reator.

A abordagem para simular estas propriedades do reator consiste na utilização do método de decomposição de Adomian [Adomian, 1988; 1994] para resolver o sistema de equações não-lineares, que consiste em expandir a solução deste sistema de equações em uma série infinita de soluções, obtidas a partir de um sistema recursivo. Este sistema recursivo consiste em gerar soluções de equações diferenciais lineares com condições iniciais em que o termo não-linear é inserido como um termo fonte que utiliza as soluções das recursões anteriores para ser calculado. O cálculo deste termo fonte utiliza polinômios

específicos chamados de polinômios de Adomian. A inicialização deste sistema, por sua vez, consiste na escolha de uma equação linear sem termo fonte com condição inicial não homogênea, enquanto as recursões sucessivas são organizadas por equações lineares com condições homogêneas e termo fonte agrupando os termos conhecidos das recursões anteriores.

O objetivo deste trabalho é resolver o sistema de equações não-lineares de cinética pontual considerando a reatividade decomposta em duas contribuições: a advinda da operação do reator e a outra da alteração da composição isotópica. A reatividade de curta escala é considerada como uma função que represente a operação de um reator, enquanto a de longa escala é considerada temporalmente dependente em virtude dos efeitos destes subprodutos. Considera-se apenas um grupo de energia de nêutrons e um grupo de precursores. A possibilidade de se decompor cada vez mais os efeitos da reatividade de um reator nuclear nos modelos de cinética pontual, evitando inseri-los dentro das variáveis de controle ou predeterminadas no sistema, é de grande interesse para se haver um melhor entendimento e representação dos fenômenos físicos envolvidos, servindo então de motivação para se seguir desenvolvendo o modelo e metodologia apresentados por Espinosa, 2016.

Enquanto o modelo estudado já detém um trabalho presente na literatura [Espinosa, 2016], o método de resolução de equações diferenciais não-lineares pela decomposição de Adomian já foi utilizado por outros autores para o caso de cinética pontual de nêutrons, destacando-se Petersen et al., 2011 e Silva, 2013; 2017, contudo utilizando para resolver a reatividade em curta escala de tempo. Estes trabalhos citados, assim como o presente trabalho, apresentam uma dificuldade computacional chamada de rigidez (*stiffness*), que consiste em sistemas em que há termos que variam entre si em diversas ordens de grandeza, dificultando a precisão e o cálculo computacional. Métodos para se reduzir o problema de rigidez [Silva, 2013], assim como o problema de determinação de exponenciais de matrizes são também apresentados neste trabalho, Capítulo 3.3.3.

No segundo capítulo abordam-se conceitos sobre a física nuclear e comportamento de reatores, entre eles, teoria de difusão de nêutrons, cinética de reatores, alguns parâmetros nucleares e ciclo do combustível nuclear. Também é apresentado um estudo sobre alguns venenos e transurânicos considerados no modelo. No terceiro capítulo apresenta-se o modelo utilizado, que consiste na derivação das equações de cinética pontual conside-

rando os efeitos dos venenos, transurânicos e queima do combustível a partir da equação de difusão de nêutrons. A metodologia de resolução deste sistema também é apresentada, assim como o método numérico e comentários quanto à implementação computacional. No capítulo quatro apresentam-se resultados numéricos assim como discussões sobre o modelo estudado no capítulo anterior. No quinto capítulo apresentam-se as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros. No Apêndice A apresentam-se resultados e gráficos complementares, o Anexo I apresenta a dedução de cinética pontual a partir das equações de difusão de nêutrons apresentado por Espinosa, 2016 e o Anexo II mostra mais detalhadamente o Método de Decomposição de Adomian.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Teoria de difusão de nêutrons

Sabendo da necessidade de avaliar o comportamento de um reator nuclear, busca-se analisar o fluxo de nêutrons presente dentro deste, que influencia diretamente na potência energética gerada. Tal fluxo depende também tanto da composição dos materiais do reator assim como de processos estocásticos relacionados às interações nucleares. O fenômeno físico do transporte de nêutrons dentro de reatores pode ser descrito pela equação de transporte (Boltzmann) [Reuss, 2008], contudo, devido sua complexidade, foram desenvolvidos diversos modelos mais simples, destacando-se o modelo de difusão de nêutrons e cinética pontual, cada um tendo seu grau de simplificação. Neste trabalho será apresentado, a partir do modelo de difusão de nêutrons, a derivação para o modelo de cinética pontual clássico e, por fim, a sua expansão para o modelo de cinética pontual com consideração dos efeitos dos venenos e alguns transurânicos.

2.1.1 Difusão de nêutrons

O modelo de difusão de nêutrons é obtido a partir de certas aproximações na equação de transporte, desconsiderando o ângulo sólido indicando a direção de propagação dos nêutrons, aproximando o termo de transporte como um termo difusivo, fazendo por fim um balanço dos nêutrons em uma região arbitrária V . Entretanto essa modelagem insere uma nova variável, a densidade de corrente de nêutrons, aproximada a partir da Lei de Fick, na Equação 2.1 [Reuss, 2008]:

$$J_x = -D \frac{d\phi}{dx} \quad (2.1)$$

onde J é o vetor densidade de corrente de nêutrons que atravessa uma unidade de área ao longo de um eixo específico por segundo e ϕ o vetor do fluxo de nêutrons, ambos compartilhando a mesma unidade, ao passo que D é o coeficiente de difusão, definido por :

$$D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \quad (2.2)$$

onde Σ_{tr} é a seção de choque macroscópica de transporte.

2.1.2 Seções de choque

Ao analisar reações nucleares, deve-se considerar o fato de que há uma grande quantidade de espaço 'vazio' entre os núcleos, visto que os nêutrons não interagem com os elétrons, que ocupam grande parte do volume do átomo, havendo apenas uma pequena área na qual se encontra o núcleo. Sendo assim, necessário considerar que há uma chance de haver ou não uma interação entre o nêutron em movimento e os núcleos dos materiais que compõem o reator. A probabilidade destas interações acontecerem é proporcional à seção de choque macroscópica, que indica a distância média entre criação e interação, sendo ela dependente de diversos fatores, como a energia do nêutron, elemento e energia do meio, assim como o tipo de interação [Reuss, 2008].

Entre os diversos tipos de interações, ressaltam-se a fissão, captura e o espalhamento. Quando um nêutron incidir em um núcleo e for absorvido, sem a reemissão de outro elemento, é chamado de captura. Caso a interação entre os dois resulte na quebra do núcleo atingido, chama-se de fissão. Já o caso de espalhamento acontece com colisão entre o núcleo e o nêutron, havendo redirecionamento (espalhamento elástico) ou reemissão de um nêutron absorvido (espalhamento inelástico) com uma variação de energia.

Define-se como seção de choque microscópica (σ) a probabilidade de interação entre um nêutron e um núcleo de um elemento, sendo descrita como uma área em centímetros quadrados (cm^2). Visto que a ordem de grandeza de uma área efetiva de um núcleo é muito inferior à ordem de $1cm^2$, utiliza-se uma nova unidade mais conveniente, chamada de barn, cuja relação é $1barn = 10^{-24}cm^2$. Contudo quando analisamos um comportamento de um reator, estamos considerando uma quantidade muito superior a um único átomo. Define-se então a seção de choque macroscópica (Σ) como sendo a probabilidade de ocorrer uma interação entre um nêutron e os núcleos presentes dentro de um material por unidade de deslocamento do nêutron [Espinosa, 2016; Sekimoto, 2007].

$$\Sigma = \sigma C \quad (2.3)$$

onde C é a concentração atômica do material, assim como foi apresentada para os precursores.

Como a maior parte dos materiais é composta de diversos elementos, assim como vários isótopos, estes apresentam diversas seções de choque, sendo necessário levá-los em

consideração[DOE 1993]. Calcula-se a seção de choque macroscópica de um material composto a partir do cálculo individual de cada isótopo ou material presente, somando-os conforme a Equação 2.4:

$$\Sigma = \sigma_1 C_1 + \sigma_2 C_2 + \dots + \sigma_n C_n \quad (2.4)$$

onde C_n e σ_n são respectivamente a densidade e seção de choque microscópica do n-ésimo elemento.

Cabe ressaltar que cada nuclídeo apresenta uma curva própria de seção de choque em função da energia dos nêutrons incidente, em virtude da sua estrutura e energia do núcleo. Ao passo que as curvas de seções de choque de espalhamento são aproximadamente constantes ao longo do espectro de energia e na ordem de poucos barn, as seções de choque de captura e fissão são altamente dependentes. Na maior parte dos casos, os elementos pesados apresentam comportamentos semelhantes [Reuss, 2008]:

1- Uma primeira região em que a seção de choque é inversamente proporcional à velocidade do nêutron incidente, reduzindo com o aumento da energia cinética. Em geral, esta região apresenta maiores seções de choque e se encontra presente no espectro 'térmico' dos nêutrons, abaixo de $1eV$.

2- Uma segunda região complexa repleta de irregularidades, composta de diversos picos causados por ressonâncias entre a energia incidente do nêutron e a estrutura dos núcleos atingidos, facilitando sua absorção. Cada nuclídeo apresenta comportamentos e energias específicas para estas ressonâncias, tendo diferentes quantidades e amplitudes destes picos para as seções de choque. Esta região normalmente se encontra numa faixa de energia chamada epitérmica, entre poucos eV até alguns keV . No caso do Urânio-238, estes picos de ressonância são extremamente altos e responsáveis por boa parte da captura de nêutrons e conseqüente geração de Plutônio em reatores térmicos.

3- A terceira região frequentemente observada para seções de choque de núcleos pesados é a de nêutrons rápidos, após a região de ressonância, em que a seção de choque cai rapidamente.

No presente trabalho, consideram-se os efeitos de captura de nêutrons pelos venenos, assim como para a geração de transurânicos. No caso dos venenos, Xenônio-135 e Samário-149, observam-se altas seções de choque de captura para energias baixas, ou seja, reatores térmicos [Espinosa, 2016]. O Urânio-238, apesar de ter uma seção de choque de

captura muito inferior aos venenos na região térmica, tem grandes seções de choque na região epitérmica devido às ressonâncias, além de ter uma concentração muito elevada, visto que este é o principal composto do combustível, participando no processo como fonte para uma cadeia de decaimento que irá gerar outros materiais físséis, com o Plutônio-239 e o Plutônio-241.

Nas Figuras 2.1, 2.2 e 2.3 apresentam-se as seções de choque para o Xenônio-135, Samário-149 e Urânio-238 em função de energia do nêutron incidente.

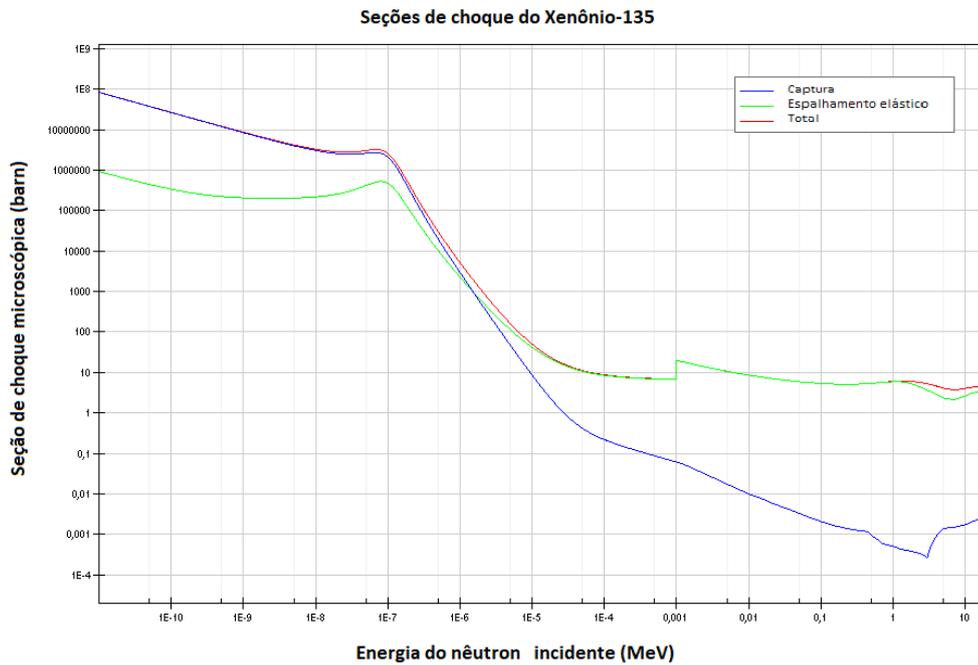


Figura 2.1 – Seções de choque microscópicas do Xenônio-135, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].

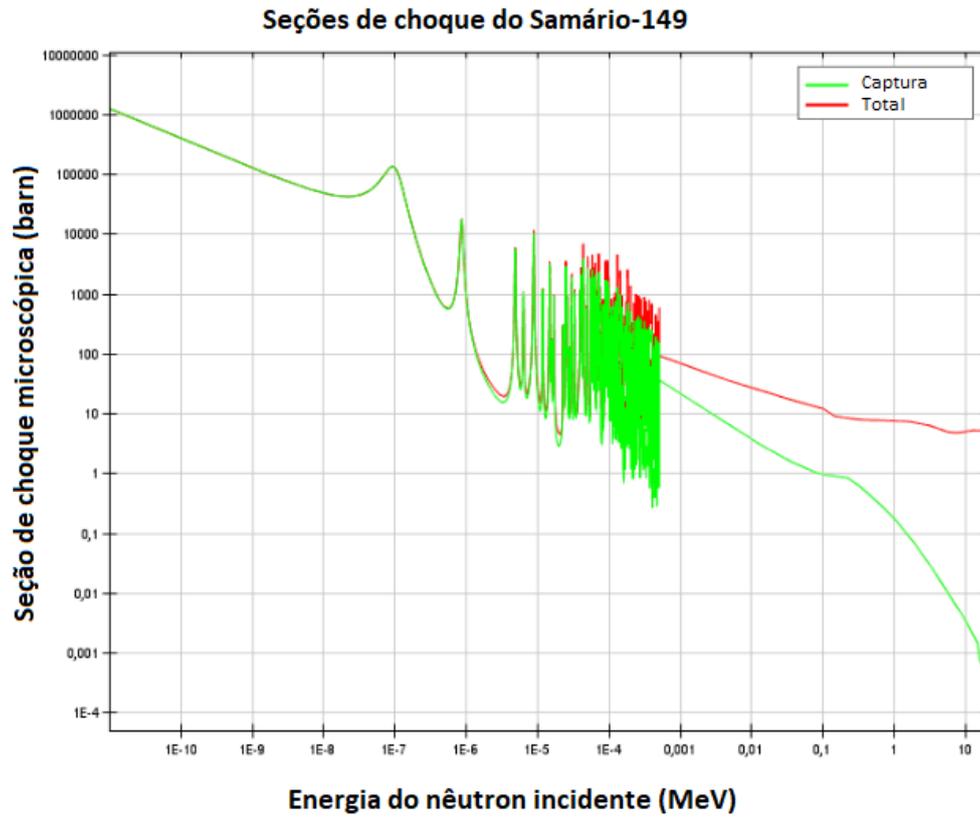


Figura 2.2 – Seções de choque microscópicas do Samário-149, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].

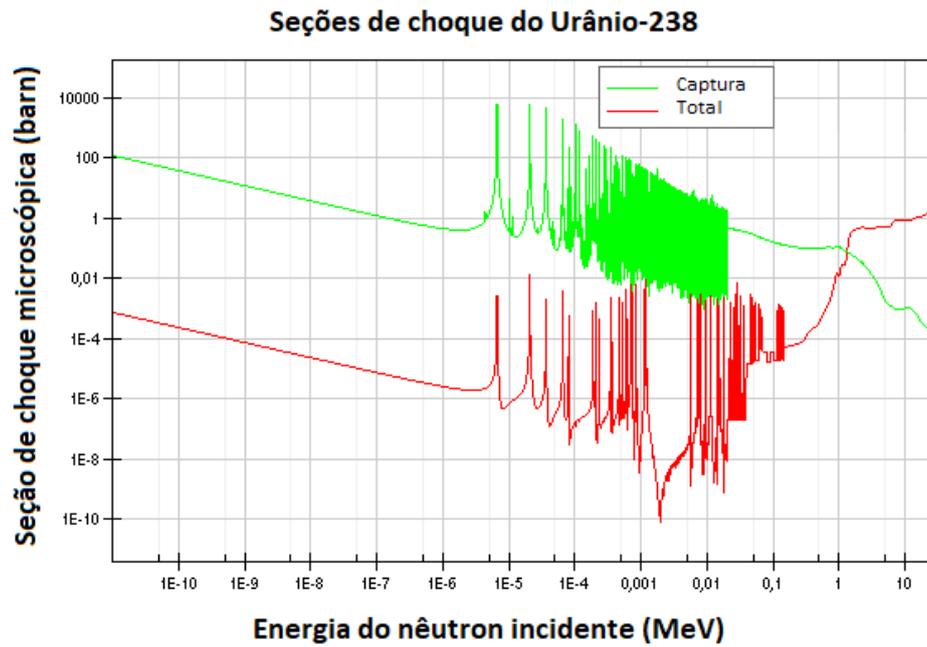


Figura 2.3 – Seções de choque microscópicas do Urânio-238, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].

Nas Figuras 2.4 e 2.5 apresentam-se as seções de choque de fissão e captura para Urânio-235 e Plutônio-239 em função de energia do nêutron incidente, estudados neste trabalho.

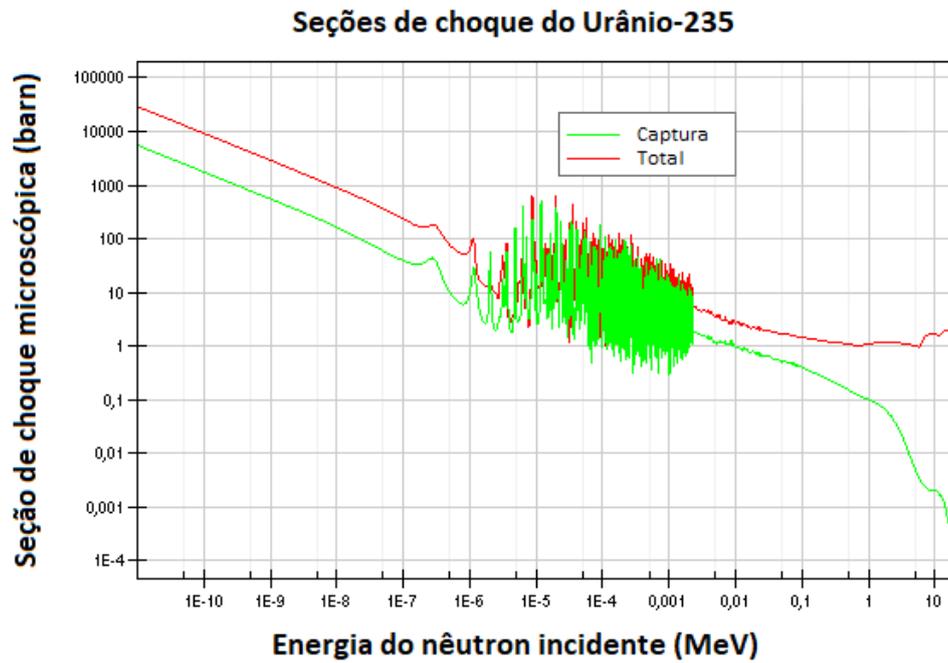


Figura 2.4 – Seções de choque microscópicas do Urânio-235, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].

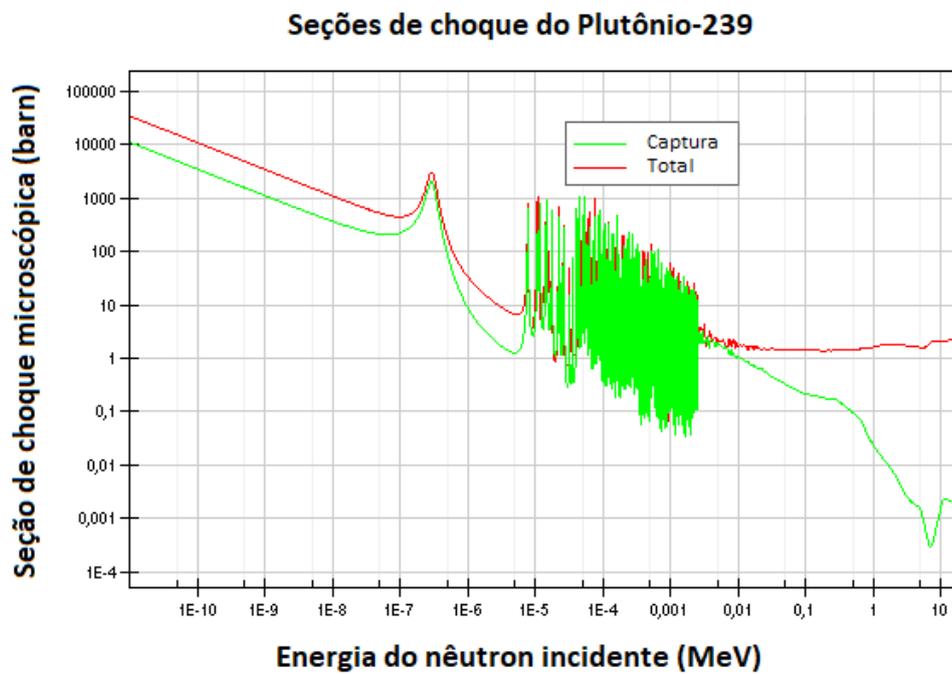


Figura 2.5 – Seções de choque microscópicas do Plutônio-239, adaptado de [Michel-Sendis, 2018].

Como comentado, tanto nas seções de choque de fissão como de captura, pode-se observar as três regiões descritas nitidamente nestes cinco elementos, apresentando valores, números de picos e frequência de ressonância diferentes.

2.1.3 Modelo multigrupo de energia

A partir do processo de fissão, pode-se observar a geração de nêutrons na faixa de $0,01eV$ até $10MeV$ como apresentado na Figura 2.6, havendo uma variação de até nove ordens de grandeza na energia destas partículas [Duderstadt e Hamilton, 1976]. Tal variação da energia cinética afeta a interação entre os nêutrons e os núcleos alvos presentes na matéria do reator, como pode ser visto na subseção 2.1.2, sendo importante a consideração de diferentes grupos de energia para levar em consideração a variação das propriedades do meio em virtude da energia do nêutron incidente.

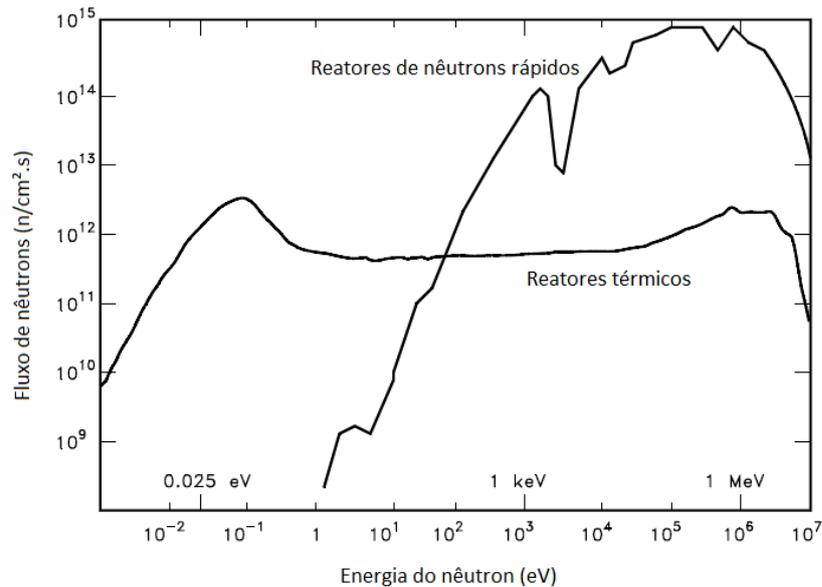


Figura 2.6 – Espectro energético dos nêutrons presentes em reatores térmicos e rápidos, adaptado de [DOE, 1993].

O modelo multigrupo de energia considera a dependência da energia do nêutron no modelo matemático utilizado, discretizando o espectro de energia do nêutron em G grupos de energia, como ilustra a Figura 2.7.

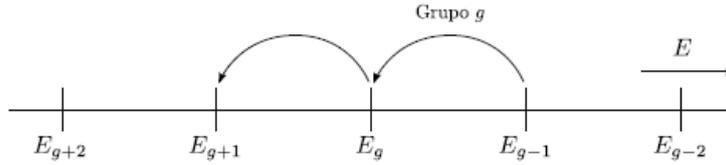


Figura 2.7 – Esquema multigrupo de energia.

Sendo G o último grupo, de menor energia, tendo seus índices ordenados de forma decrescente, concordando com o comportamento físico dos nêutrons perderem energia ao percorrer o meio. Discretiza-se então o fluxo de nêutrons ϕ_g assim como as propriedades do meio para cada grupo de energia g [Petersen, 2011]. Considerando o balanço de nêutrons dentro de cada grupo de energia assim como as aproximações anteriormente citadas, obtém-se a equação de difusão de nêutrons considerando multigrupos de energia:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(r, t) = \nabla \cdot D_g(r, t) \nabla \phi_g(r, t) - \Sigma_{ag}(r, t) \phi_g(r, t) + Q_g(r, t) \\ - \Sigma_{sg}(r, t) \phi_g(r, t) + \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{sg'g}(r, t) \phi_{g'}(r, t) \end{aligned} \quad (2.5)$$

sendo o subíndice g o grupo de energia respectivo, variando de $g = 1 : G$, r a posição no espaço e t o instante de tempo considerado, onde $\phi_g(r, t)$ representa o fluxo de escalar de nêutrons, v_g é a velocidade dos nêutrons, $D_g(r, t)$ consiste no coeficiente de difusão. Já $\Sigma_{ag}(r, t)$, $\Sigma_{sg}(r, t)$ e $\Sigma_{sg'g}(r, t)$ representam respectivamente as seções de choque macroscópicas de absorção de nêutrons, de espalhamento de nêutrons do grupo g para o próprio grupo e a de espalhamento dos demais grupos para o grupo g . Q_g consiste na fonte de nêutrons e pode-se separá-la em duas contribuições, uma em virtude das fissões nucleares e outra fornecida por uma fonte externa, descrita na Equação 2.6:

$$Q_g(r, t) = Q_g^{ext} + \chi_g \sum_{g' \neq g}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(r, t) \phi_{g'}(r, t) \quad (2.6)$$

onde Q_g^{ext} é a fonte externa de nêutrons, χ_g representa a fração de nêutrons que é gerada na faixa de energia do grupo g , ν_g consiste no número médio de nêutrons emitidos por fissão e $\Sigma_{fg'}(r, t)$ representa a seção de choque macroscópica de fissão de nêutrons.

Os termos do lado direito da Equação 2.5 podem ser interpretados da seguinte

forma:

- O primeiro termo consiste na perda de nêutrons por fuga do reator.
- O segundo termo representa os nêutrons absorvidos pelo material do reator.
- O terceiro termo consiste na contribuição de nêutrons por fontes externas e fissão dentro do reator.
- O quarto representa a perda de nêutrons de um grupo de energia g para outro grupo de energia g' .
- O quinto representa as contribuições pela transferência de nêutrons de um grupo g' para o grupo g .

Diversos estudos já foram conduzidos nesta área, avaliando o comportamento de um reator com dois ou mais grupos de energia, considerando os efeitos unidimensionais e bidimensionais, em regimes estacionários e transientes [Schramm, 2016; Ceolin, 2014]. Neste trabalho, contudo considerar-se-á apenas um único grupo de energia.

2.2 Cinética de reatores

Para um reator nuclear operar com uma potência constante, a geração de nêutrons por reações deve ser igual à perda destes por absorção e fuga de nêutrons para fora do reator. Caso haja diferença entre estas quantidades, o fluxo passa a apresentar um comportamento transiente, conseqüentemente a potência deste reator também. A disparidade do balanço de nêutrons pode ocorrer por diversos fatores, desde variáveis controladas pelo operador do reator como movimento das barras de controle, até mudanças nas propriedades ou materiais do reator. Tais mudanças podem, por exemplo, serem resultado da variação de temperatura ou geração de transurânicos ou venenos produtos da absorção ou fissão, respectivamente [Espinosa, 2016].

O estudo do comportamento do reator transiente do reator e seu fluxo de nêutrons é chamado de cinética de reatores nucleares. Um caso mais específico consiste na cinética pontual de reatores, que desconsidera a forma da distribuição espacial do fluxo de nêutrons dentro do reator, analisando apenas a dependência temporal do sistema [Duderstadt e Hamilton, 1976]. Este trabalho será focado inicialmente na análise de cinética

pontual de um reator, seguida de uma análise da variação de algum material dentro deste. Considera-se a geração de substâncias com alta capacidade de absorção de nêutrons que são gerados a partir da fissão de materiais físeis, chamados de venenos, e novos materiais físeis resultantes de captura de um nêutron pelo nuclídeo de Urânio-238, chamados de transurânicos, que contribuem na alteração da densidade de nêutrons dentro do reator. Os elementos estudados especificamente serão o Xenônio-135 (Xe-135), Samário-149 (Sm-149) e Plutônio-239 (Pu-239) devido seus efeitos mais expressivos dentro de um reator nuclear térmico.

2.3 Nêutrons atrasados

A partir do momento em que se analisa a produção de nêutrons sob uma perspectiva temporal, deve-se considerar que nem todos os nêutrons gerados são produzidos no mesmo instante ou escala de tempo. Em um reator nuclear, uma parcela é gerada quase instantaneamente a partir da fissão, na escala de tempo de 10^{-14} segundos [Duderstadt e Hamilton, 1976], chamados de nêutrons prontos. A outra parcela, chamada de nêutrons atrasados, é gerada a partir do decaimento de alguns produtos instáveis da fissão, chamados de precursores de nêutrons, sofrem decaimentos β^- com a emissão de um nêutron e tem a meia-vida na ordem entre alguns milissegundos até alguns segundos. Como é apresentado na Figura 2.8, a fissão de núcleos pesados pode produzir uma grande variedade de fragmentos de fissão, com diferentes probabilidades cada um. Sendo esta fissão geralmente assimétrica, produz-se um fragmento mais leve e um mais pesado e ambos normalmente acima da curva da zona de estabilidade [Reuss, 2008].

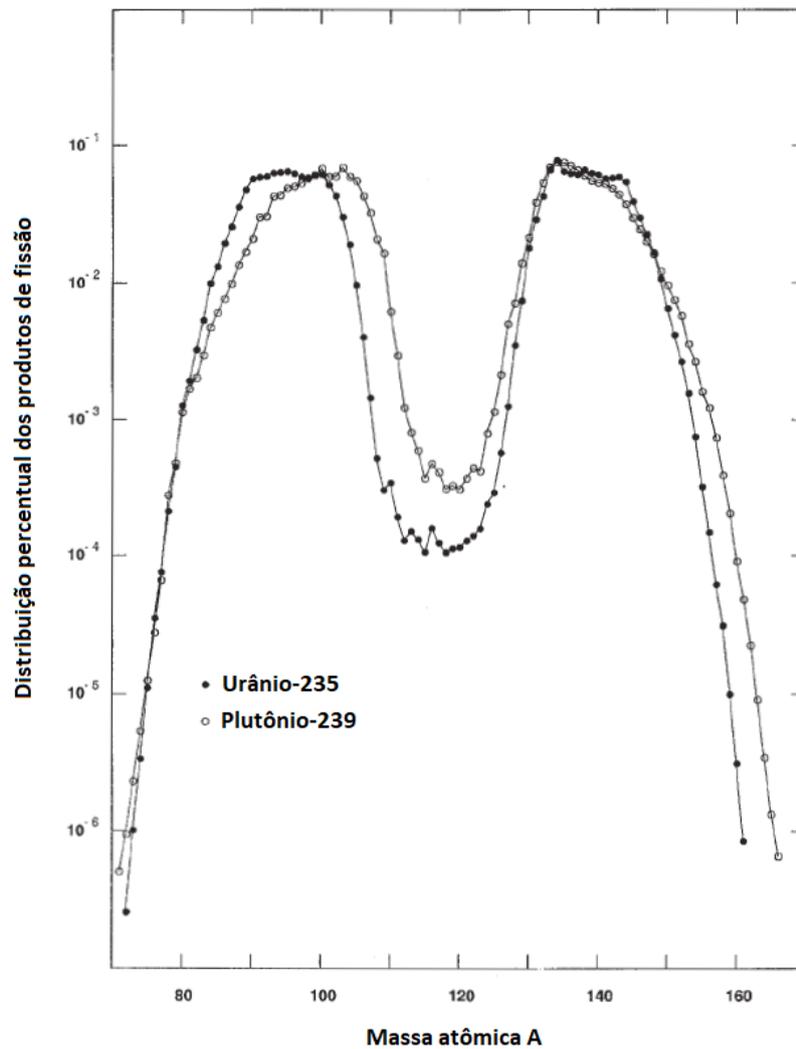


Figura 2.8 – Distribuição percentual dos produtos de fissão do Plutônio-239 e Urânio-235, adaptado de [Reuss, 2008].

Ressalta-se que mesmo tendo uma parcela na ordem inferior a 1% do total de nêutrons gerados dentro do reator, os nêutrons atrasados são fundamentais para analisar corretamente o seu comportamento transiente, quando há alteração da potência. A energia dos nêutrons liberados a partir de cada processo também varia, sendo os nêutrons prontos gerados com maiores faixas de energia média ($2MeV$) e os atrasados com faixas inferiores ($0,5MeV$), apresentando influências diferentes no reator [Hetrick, 1971].

Aproximadamente 800 produtos de fissão produzindo precursores atrasados de nêutrons já foram catalogados, muitos destes apresentam tempos de meia-vida semelhantes, e pode-se simplificar este espectro em 6 principais grupos de precursores, no caso de reatores nucleares térmicos. A Tabela 2.1 abaixo apresenta os diferentes grupos de precursores

para o Urânio-235 (U-235) e Plutônio-239, assim como o tempo de meia-vida e fração de nêutrons atrasados gerados por estes [Duderstadt e Hamilton, 1976].

Tabela 2.1 – Grupos de precursores de nêutrons para Urânio-235 e Plutônio-239

grupo (i)	λ_i [s^{-1}]	β_i (Urânio-235)	β_i (Plutônio-239)
1	0,0124	0,00021	0,000073
2	0,0305	0,00141	0,000626
3	0,111	0,00127	0,000443
4	0,301	0,00255	0,000685
5	1,14	0,00074	0,000181
6	3,01	0,00027	0,000092
total		0,0064	0,0021

Na Tabela 2.1 observam-se os 6 grupos diferentes de precursores existentes para Urânio-235 e Plutônio-239, sendo que λ_i consiste na constante de decaimento de cada grupo i respectivamente e β_i consiste na fração de nêutrons gerados atrasados pelo grupo i do total de nêutrons produzidos. No caso do Urânio-235 e do Plutônio-239, a soma dos nêutrons atrasados consiste em $\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i$, resultando em $\beta_U = 0,0065$ e $\beta_{Pu} = 0,0020$. Em virtude de ser uma primeira abordagem, da baixa concentração de transurânicos e seu baixo percentual de precursores, este trabalho irá considerar somente os precursores do Urânio e apenas um grupo, deixando para trabalhos futuros considerar mais grupos de precursores, assim como os precursores gerados pela fissão de outros elementos.

A variação da concentração de um grupo de precursores é dada pelo balanço entre a fissão do Urânio-235 e pelo decaimento posterior destes precursores, sendo apresentada na Equação 2.7:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(r, t) = \beta_i v \Sigma_f(r, t) \phi(r, t) - \lambda_i C_i(r, t) \quad (2.7)$$

sendo $C_i(r, t)$ a concentração do precursor i no ponto r e tempo t . Considerando o caso abordado neste trabalho, considera-se apenas um grupo de energia e um grupo de precursores em um meio homogêneo, resultando no sistema de duas equações, sendo a primeira equação de cinética espacial e a segunda apenas de cinética:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, t) &= [D \nabla^2 - \Sigma_a + (1 - \beta) v \Sigma_f] \phi(r, t) + \lambda C(r, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} C(r, t) &= \beta v \Sigma_f \phi(r, t) - \lambda C(r, t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

2.4 Venenos do reator

Como foi discutido na seção 2.3, a fissão de elementos pesados gera uma grande variedade de elementos mais leves que permanecem no interior do reator, decaindo ou interagindo com o fluxo de nêutrons existente. Parte destes elementos, chamados de venenos, apresentam grandes seções de choque de captura para faixas de baixa energia, funcionando como fortes absorvedores de nêutrons e reduzindo a potência do reator ao longo do tempo. Em virtude da grande variedade de produtos de fissão, busca-se simplificar os efeitos dos venenos aos elementos mais impactantes, como Xenônio-135 e Samário-149 [Reuss, 2008].

Para cada produto de fissão, pode-se descrever a variação de sua concentração a partir da Equação 2.9:

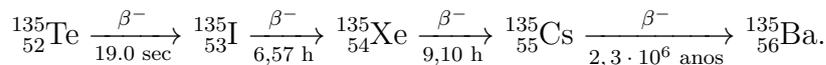
$$\frac{d}{dt}C_i(t) = \gamma_i \Sigma_f \phi(t) - \lambda_i C_i(t) - \sigma_{c,i} C_i(t) \phi(t) + \lambda_j C_j(t) + \sigma_{c,k} C_k(t) \phi(t) \quad (2.9)$$

que é descrita da seguinte forma:

- O primeiro termo do lado direito da equação consiste na produção gerada diretamente pela fissão do combustível nuclear, onde γ_i consiste na fração de geração do elemento i a partir da fissão.
- O segundo termo representa a perda deste elemento por decaimento, onde λ_i é a constante de decaimento do elemento i .
- O terceiro termo considera o desaparecimento deste produto pela captura de um nêutron, onde $\sigma_{c,i}$ é a seção microscópica de captura do elemento i .
- O quarto termo representa a produção pelo decaimento de outros elementos, em que $C_j(t)$ e λ_j correspondem a concentração e constante de decaimento destes outros elementos que produzem o elemento i a partir do decaimento radioativo.
- O quinto termo corresponde a geração deste isótopo a partir da captura de nêutrons por outros produtos de fissão, onde $C_k(t)$ e $\sigma_{c,k}$ são respectivamente a concentração e seção de choque microscópica de captura de outros elementos produtos de fissão que contribuem para a geração do elemento i .

2.4.1 Xenônio

O Xenônio-135 é o isótopo artificial e instável, cujo núcleo apresenta a maior seção de choque de captura conhecida para nêutrons térmicos, na ordem de $2,6 \cdot 10^6 \text{ barn}$. A produção deste elemento consiste em uma pequena parcela advinda da fissão, aproximadamente 0,1%, e uma segunda e majoritária parcela vinda do decaimento do Iodo-135 (I-135), que por sua vez também é produzido por fissão e pelo decaimento do Telúrio-135, como pode ser descrito a seguir:



Considera-se a simplificação do I-135 ser produzido diretamente pela fissão, visto que a meia-vida do Telúrio-135 é bem menor do que os demais elementos. Cerca de 95% do Xe-135 vem do decaimento do I-135, sendo a meia vida e concentração do I-135 fundamental para se avaliar a geração deste veneno [Espinosa, 2016]. Devido a seção de choque de captura do I-135 ser muito pequena, desconsidera-se o seu termo de queima [DOE, 1993]. O termo de geração a partir de captura por outros produtos de fissão é desconsiderado nos balanços apresentados.

A taxa de variação da concentração do I-135 é:

$$\frac{d}{dt}C_I(r, t) = \gamma_I \Sigma_f \phi(r, t) - \lambda_I C_I(r, t) \quad (2.10)$$

onde $C_I(r, t)$ é a concentração do I-135, γ_I é a fração de geração de I-135 a partir da fissão e λ_I a constante de decaimento do I-135. Ao passo que a taxa de variação da concentração do Xe-135 é descrita por:

$$\frac{d}{dt}C_{Xe}(r, t) = \gamma_{Xe} \Sigma_f \phi(r, t) + \lambda_I C_I(r, t) - \lambda_{Xe} C_{Xe}(r, t) - \sigma_{Xe} C_{Xe}(r, t) \phi(r, t) \quad (2.11)$$

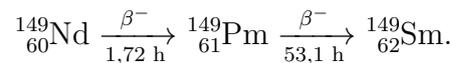
onde $C_{Xe}(r, t)$ é a concentração, γ_{Xe} é a fração de geração a partir da fissão, λ_{Xe} a constante de decaimento e σ_c^{Xe} é a seção microscópica de captura. Todas do elemento Xe-135, respectivamente.

2.4.2 Samário

A mesma análise pode ser feita quanto ao Samário-149, gerado diretamente pelo decaimento do Promécio-149 e tendo uma grande seção de choque de captura, aproxima-

damente $4,1 \cdot 10^4 \text{ barn}$. Considera-se o segundo veneno mais importante a ser analisado apesar de ser o sexto colocado na ordem de grandeza das seções de choque de captura, em virtude de ser um elemento estável e ir se acumulando durante a operação e mesmo após o desligamento do reator. Seu efeito também só é relevante em reatores de nêutrons térmicos [DOE, 1993].

A geração de Samário é resultado do decaimento de Neodímio-149 e Promécio-149 (Pm-149), como apresentado no esquema a seguir:



Assim como foi feito para o Telúrio-135, desconsidera-se o Neodímio-149 e considera-se a geração direta de Pm-149 em virtude da diferença muito grande entre os tempos de decaimentos. Foram desconsideradas a queima de Promécio-149 em razão da pequena seção de choque de captura e a contribuição da produção do Sm-149 por fissão devido sua pequena porcentagem gerada diretamente. Como Sm-149 é um elemento estável, sua redução só acontece por captura de nêutrons, acumulando-se em um valor limite quando não houver mais nêutrons livres no reator.

Equaciona-se o balanço das concentrações de Pm-149 e Sm-149 da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}C_{Pm}(r, t) = \gamma_{Pm}\Sigma_f\phi(r, t) - \lambda_{Pm}C_{Pm}(r, t) \quad (2.12)$$

$$\frac{d}{dt}C_{Sm}(r, t) = \lambda_{Pm}C_{Pm}(r, t) - \sigma_c^{Sm}C_{Sm}(r, t)\phi(r, t) \quad (2.13)$$

onde $C_{Pm}(r, t)$ é a concentração do Pm-149, $C_{Sm}(r, t)$ é a concentração do Sm-149, γ_{Pm} e λ_{Pm} são a fração de geração a partir da fissão e a constante de decaimento do Pm-149, respectivamente e σ_c^{Sm} é a seção de choque microscópica de captura do Sm-149.

2.5 Urânio

O Urânio é um elemento que pode ser encontrado na natureza, sendo composto em sua grande maioria pelos isótopos Urânio-238 (99,27%) e Urânio-235 (0,72%) [DOE, 1993]. O U-235 apresenta uma considerável seção de choque de fissão e é físsil para nêutrons de baixa energia, por isso é utilizado como combustível principal para reatores térmicos. A proporção de átomos de U-235 em relação aos seus demais isótopos é chamada de enriquecimento. Vários modelos de reatores foram desenvolvidos, utilizando diferentes

níveis de enriquecimento no combustível [Murray, 2008]. O U-235 apresenta uma meia-vida muito longa ($7,038 \cdot 10^8 \text{anos}$) [Nichols et al., 2008], sendo praticamente constante para períodos de tempo utilizados em reatores nucleares, por isso é desconsiderada no modelo. O seu consumo pode ser descrito apenas pela sua fissão dentro do reator, descrito pela Equação 2.14:

$$\frac{d}{dt}C_{U_{235}}(r, t) = -\sigma_f^{U_{235}}C_{U_{235}}(r, t)\phi(r, t), \quad (2.14)$$

onde $C_{U_{235}}(r, t)$ e $\sigma_f^{U_{235}}$ são a concentração e seção de choque microscópica de fissão do U-235, respectivamente.

O Urânio-238 (U-238), por sua vez, é majoritário nos compostos encontrados na natureza e também nos combustíveis utilizados em reatores nucleares, contudo só se comporta como material físsil para nêutrons de alta energia, sendo assim utilizado para fissão em reatores rápidos ou *fast breeding reactors*. Contudo este isótopo também permite a geração de outros elementos físséis para baixas e altas energias a partir da sua absorção de nêutrons e subsequentes decaimentos, denominados transurânicos, descritos na próxima seção.

2.6 Transurânicos

Mesmo que o efeito de captura seja mais pronunciado em certos venenos, é preciso considerar que ele não ocorre apenas nos produtos de fissão, mas também nos elementos pesados, como no U-235 assim como no U-238. A absorção de um nêutron sem causar fissão nestes elementos pode acabar gerando outros elementos físséis que pode acabar contribuindo para geração de nêutrons e influenciando o fator de multiplicidade efetiva de nêutrons, o chamado k_{eff} . O fator de multiplicidade efetiva representa diretamente a razão entre a geração de nêutrons pela fissão e a perda de nêutrons por captura ou fuga em uma geração, sendo $k_{eff} < 1$ um reator subcrítico, $k_{eff} = 1$ crítico e $k_{eff} > 1$ supercrítico. É relevante então analisar o efeito da geração e fissão destes elementos, chamados de transurânicos, resultantes da conversão de elementos pesados presentes no reator [Murray, 2008].

No caso do Urânio-235, resulta-se em Urânio-236, que é considerado um veneno pois não é físsil. Já a captura de um nêutron pelo U-238 resulta em uma série de decaimento na qual pode gerar uma série de elementos, entre eles o Plutônio-239 e Plutônio-241, que são considerados elementos físséis e correspondem a aproximadamente um terço dos

combustíveis consumidos em um reator térmico ao longo de seu ciclo. Uma descrição dessa série de elementos pesados a partir do U-238 e U-235 é apresentada na Figura 2.9.

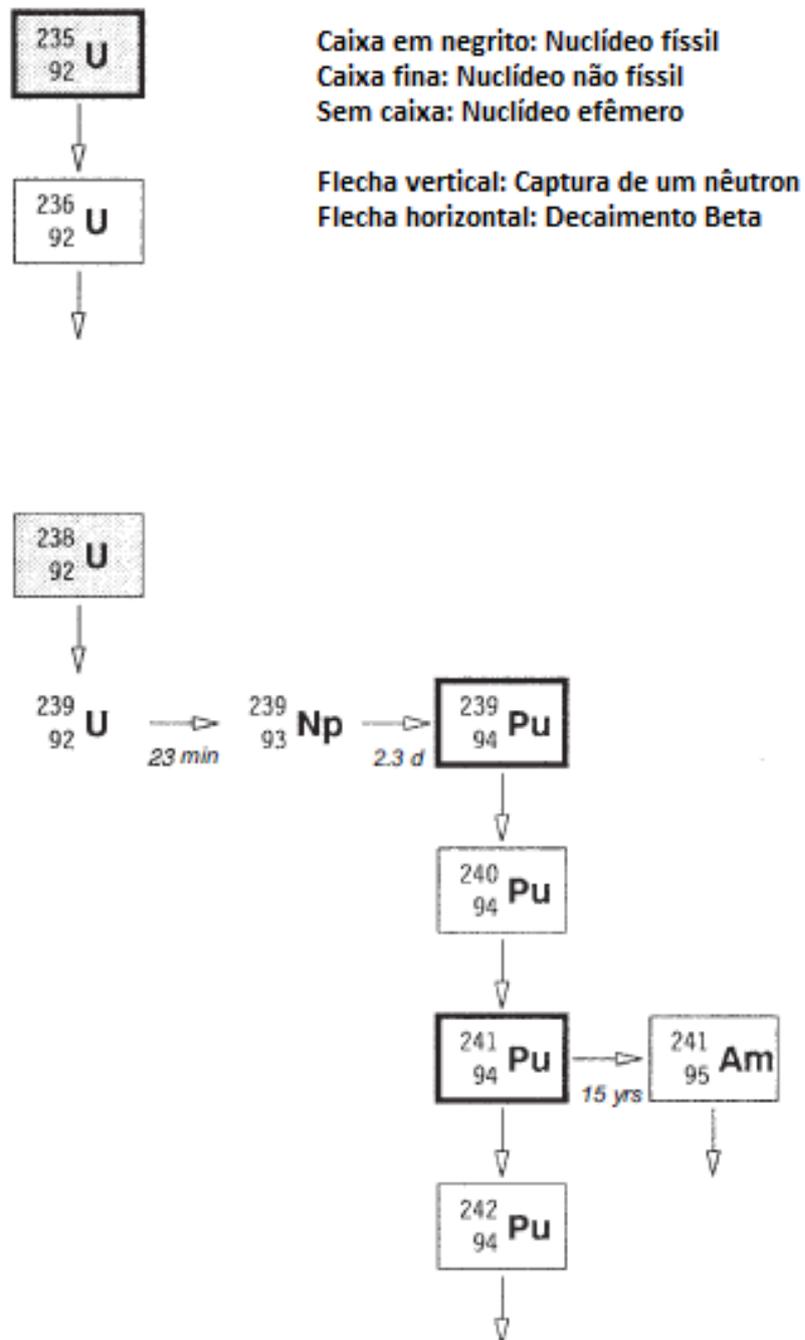
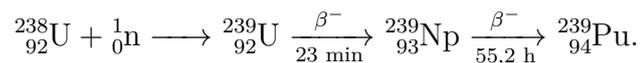


Figura 2.9 – Cadeia de geração de transurânicos da cadeia do Urânio-235 e Urânio-238, adaptado de [Reuss, 2008].

A Figura 2.9 apresenta a cadeia de geração de transurânicos a partir do U-238. A

geração do primeiro e principal material físsil artificial (Plutônio-239) ocorre relativamente rápido, na ordem de poucos dias após da captura de um nêutron pelo U-238. Em reatores com nêutrons térmicos, há uma probabilidade considerável ainda que este Plutônio-239 absorva um outro nêutron, gerando Plutônio-240, que não é físsil. Por sua vez este elemento pode absorver outro nêutron, gerando o segundo elemento físsil desta série, o Plutônio-241. A série pode prosseguir gerando outros elementos, como Plutônio-242, ou decaindo e gerando Amerício-241. Tirando os primeiros elementos desta série, os tempos de meia-vida são bastante elevados, sendo na ordem de vinte mil anos para Plutônio-239 e quinze anos para Plutônio-241 [Reuss, 2008].

Neste trabalho considera-se apenas a série do U-238 até a geração do Pu-239, em virtude de ser uma abordagem inicial do tema e este ser o primeiro e um dos principais transurânicos para reatores térmicos. A cadeia simplificada então fica da forma:



Semelhante aos casos dos venenos, optou-se por considerar a geração de Neptúncio-239 (Np-239) direta a partir do U-238, em virtude da diferença de escala de tempo existente entre a meia vida do Urânio-238 e Neptúncio-239. O Np-239 é considerado um material estéril e não é físsil. O Pu-239, por ter um decaimento muito lento em relação ao período de operação de um reator, teve seu decaimento também desconsiderado no modelo. Segue o sistema de equações para a geração e redução dos transurânicos:

$$\frac{d}{dt}C_{Np}(r, t) = \sigma_c^{U238}C_{U238}(r, t)\phi(r, t) - \lambda_{Np}C_{Np}(r, t) - \sigma_{Np}C_{Np}(r, t)\phi(r, t) \quad (2.15)$$

$$\frac{d}{dt}C_{Pu}(r, t) = \lambda_{Np}C_{Np}(r, t) - (\sigma_c^{Pu} + \sigma_f^{Pu})C_{Pu}(r, t)\phi(r, t) \quad (2.16)$$

onde $C_{Np}(t)$ consiste na concentração de Np-239, σ_c^{U238} é a seção de choque microscópica de captura do U-238, λ_{Np} e σ_{Np} são a constante de decaimento e seção de choque microscópica de captura do Np-239, respectivamente. $C_{Pu}(t)$ é a concentração de Pu-239 no reator, assim como σ_c^{Pu} e σ_f^{Pu} são as seções de choque microscópicas de captura e fissão do Pu-239 respectivamente.

2.7 Ciclo de vida do combustível nuclear

Em virtude das interações nucleares, um reator nuclear altera sua composição ao decorrer do tempo, reduzindo a eficiência do combustível até um ponto em que este não possui mais elementos físséis em concentrações suficientes para manter uma reação em cadeia controlada e manter o reator funcionando. Após este limiar ser atingido, o combustível é retirado do reator e processado para que sejam reaproveitados os materiais físséis ainda presentes para a geração de um novo combustível reciclado, e o restante não aproveitável é separado para outras finalidades. Uma esquematização do ciclo completo do combustível nuclear pode ser observada na Figura 2.10:

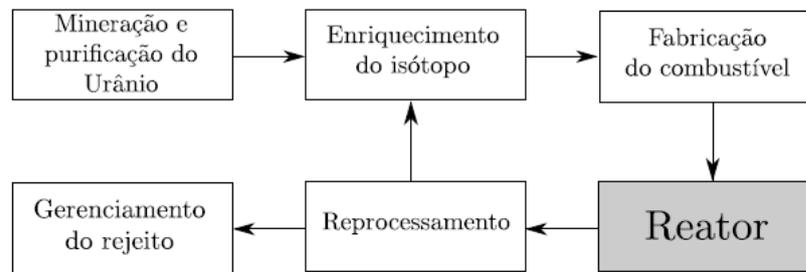


Figura 2.10 – Ciclo do combustível nuclear [Espinosa, 2016].

Chama-se de ciclo do combustível nuclear todo o processo desde a mineração até o descarte dele, passando pelo enriquecimento, fabricação, utilização e reprocessamento. No reprocessamento, busca-se separar a grande maioria do urânio existente no fim da utilização para novas etapas de enriquecimento enquanto o plutônio e o urânio remanescente são utilizados para a geração de um combustível nuclear misto, chamado de Mixed Oxide (MOX) [Duderstadt e Hamilton, 1976].

O urânio costuma ficar na ordem de três anos dentro de um reator nuclear, sendo consumido e gerando subprodutos. Depois de um ano de operação, parte do material mais antigo e gasto é retirado do reator e o restante do combustível é redistribuído junto com a adição de uma nova parcela de material novo, mantendo diversos ciclos de combustível no mesmo reator em operação [Duderstadt e Hamilton, 1976; Reuss, 2008]. Um exemplo da redistribuição do combustível é apresentado na Figura 2.11, onde apresenta a organização das varetas de urânio dentro do reator onde há combustíveis de diferentes ciclos presentes.

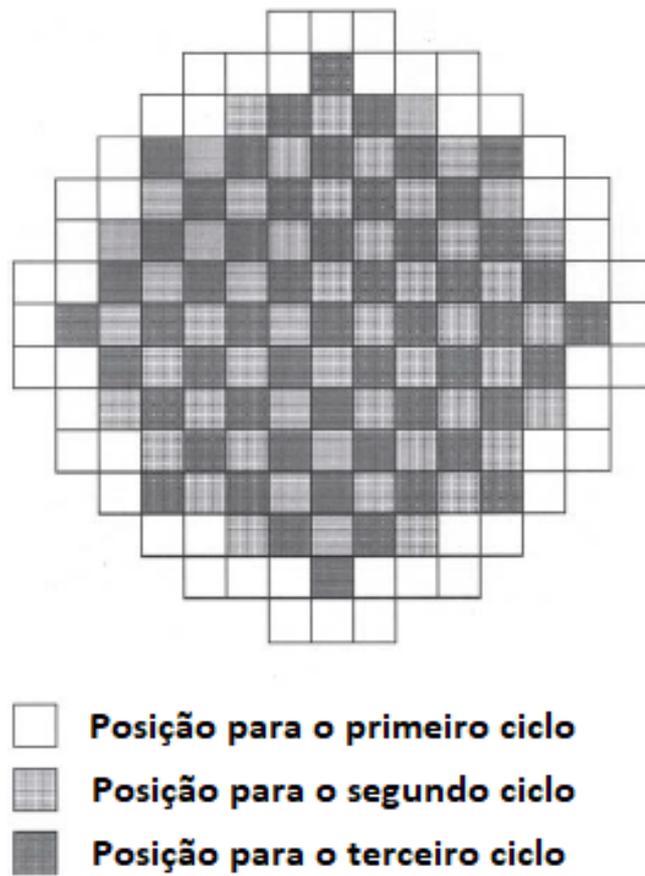


Figura 2.11 – Diagrama de rearranjo dos elementos de combustível em reatores com mais de um ciclo de combustível, adaptado de [Reuss, 2008].

3 MODELAGEM E METODOLOGIA APLICADA

Neste capítulo, é apresentado a modelagem de cinética pontual para um reator nuclear térmico, a metodologia para a resolução das equações diferenciais a partir do método de decomposição de Adomian e medidas tomadas para facilitar o cálculo computacional. O desenvolvimento do modelo de cinética e o modelo dos venenos segue o mesmo proposto por Espinosa, 2016 e uma extensão deste método é apresentada para o caso da geração de transurânicos no reator, assim como a consideração da queima do combustível.

3.1 Cinética pontual considerando venenos e transurânicos

Espinosa, 2016, apresentou uma metodologia em que utiliza inicialmente a equação da difusão de nêutrons para o desenvolvimento da equação de cinética pontual, melhor apresentada no Anexo I. Em sùmula, subtrai-se da equação de difusão transiente do fluxo de nêutrons, multiplicada pelo fluxo adjunto, a equação de difusão estacionária do fluxo adjunto, que por sua vez é multiplicada pelo fluxo de nêutrons. Esta operação é realizada para definir um instante inicial t_0 a partir do qual o reator será analisado. Em seguida, integrando equação resultante no espectro de energia e no volume do reator, encontra-se a Equação 3.1:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \left(\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \frac{1}{v(E)} \phi(r, E, t) dE d^3r \right) \\
&= \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \left(\int_0^\infty \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) + \delta \Sigma_s \right) \phi(r, E', t) dE \\
&+ \nabla \cdot (\delta D(r, E, t) \nabla \phi(r, E, t)) - \delta \Sigma_t(r, E, t) \phi(r, E, t) \Big) dE d^3r \\
&- \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \left(\int_0^\infty \beta \chi_d(E) \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) \phi(r, E', t) dE' \right) dE d^3r \\
&+ \lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \chi_d(E) C(r, t) dE d^3r.
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Define-se então:

$$\delta D(r, E, t) \equiv D(r, E, t) - D(r, E, t_0), \tag{3.2}$$

$$\chi(E) = (1 - \beta) \chi_p(E) + \beta \chi_d(E), \tag{3.3}$$

$$\Sigma_t(r, E, t) = \Sigma_c(r, E, t) + \Sigma_f(r, E, t) + \Sigma_s(r, E, t), \tag{3.4}$$

e

$$\delta\Sigma_x(r, E, t) \equiv \Sigma_x(r, E, t) - \Sigma_x(r, E, t_0) = \sum_{i=1}^I [C_i(r, t) - C_i(r, t_0)]\sigma_x^i(E), \quad (3.5)$$

onde E é a variável independente da energia dos nêutrons, $v(E)$ é a velocidade dos nêutrons, $C_i(r, t)$ é a concentração isotópica do nuclídeo i , $\phi^*(r, E, t)$ é o fluxo adjunto, $\chi_p(E)$ e $\chi_d(E)$ são respectivamente as contribuições de fissão de nêutrons prontos e atrasados. $\Sigma_x(r, E, t)$ é a seção de choque macroscópica para a reação do tipo x (fissão- f , captura- c , espalhamento- s e transporte- tr).

Quando se estuda problemas de cinética de reatores, utiliza-se geralmente a aproximação em que o fluxo de nêutrons varia sua amplitude sem alterar sua distribuição espacial, separando o fluxo em duas funções, uma variável espacial e outra temporal. Com esta aproximação, pode-se analisar separadamente cada parâmetro. No caso de cinética pontual, integra-se o reator no volume e espectro de energia, analisando-se apenas a contribuição temporal do fluxo. O mesmo pode ser estimado para a concentração dos precursores, sendo descritos a seguir:

$$\begin{aligned} \phi(r, E, t) &\cong f(r, E)n(t) \\ C(r, E, t) &\cong f(r, E)C(t), \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde $f(r, E)$ é a função que configura a distribuição espacial do fluxo de nêutrons e concentração de precursores e $n(t)$ é a densidade de nêutrons no tempo t dentro do reator, geralmente representado em [cm^{-3}]. Como os precursores apresentam apenas operador diferencial temporal e nenhum operador nas variáveis espaciais, oriundo da densidade de corrente de nêutrons, suas distribuições espaciais seguem o perfil do fluxo de nêutrons $\phi(r, E, t)$, sendo descritos pela função $f(r, E)$ [Oliveira, 2017].

Pode-se reduzir a Equação 3.1 à:

$$\frac{d}{dt}n(t) = \frac{\rho(t) - \beta(t)}{\Lambda}n(t) + \lambda C(t), \quad (3.7)$$

onde Λ é o tempo médio de geração entre o nascimento do nêutron pronto e sua sequente absorção induzindo fissão, definida em segundos, e $\rho(t)$ é definida como a reatividade do reator, adimensional, que representa três estados do reator, da mesma forma que o k_{eff} . Um reator pode ser considerado subcrítico caso $\rho(t) < 0$, crítico se $\rho(t) = 0$ e supercrítico quando $\rho(t) > 0$. No caso particular em que o reator é crítico ($\rho(t) = 0$), o balanço de nêutrons resultante da geração, absorção e fuga é nulo, fazendo a densidade

de nêutrons permanecer constante ao decorrer do tempo. Os termos da equação anterior são apresentados detalhadamente nas seguintes equações:

$$\Lambda \equiv \frac{1}{F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(r, E) dE d^3r \quad (3.8)$$

e

$$\begin{aligned} \rho(t) \equiv & \frac{1}{F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \left(\int_0^\infty [\chi(E') \nu(E') \delta \Sigma_f(r, E', t) \right. \\ & + \delta \Sigma_s(r, E' \rightarrow E, t)] f(r, E') dE' + \nabla \cdot [\delta D(r, E, t) \nabla f(r, E)] \\ & \left. - \delta \Sigma_t(r, E, t) f(r, E) \right) dE d^3r \end{aligned} \quad (3.9)$$

Define-se também:

$$\bar{\beta}(t) \equiv \frac{\beta}{F} \int_V \left[\int_0^\infty \chi_d(E) \phi^*(r, E, t_0) dE \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) f(r, E') dE' \right] d^3r \quad (3.10)$$

e

$$C(t) \equiv \frac{1}{\Lambda F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \chi_d(E) C(r, t) dE d^3r \quad (3.11)$$

considerando:

$$F \equiv \int_V \left[\int_0^\infty \chi(E) \phi^*(r, E, t_0) dE \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) f(r, E') dE' \right] d^3r \quad (3.12)$$

Com o objetivo de analisar o comportamento da densidade de nêutrons em um reator considerando a geração de venenos e transurânicos, faz-se as seguintes suposições:

1. A concentração de U-238 é considerada constante em virtude de ser ordens de grandeza maior do que os outros elementos dentro do reator. Consistindo na ordem de 96% à 97% da constituição do combustível nuclear, para reatores térmicos de água pressurizada.
2. Desconsidera-se os precursores gerados pelo Pu-239, como uma primeira abordagem do problema, considerando ainda sua contribuição para a reatividade e sua geração de venenos do reator.
3. Desconsidera-se os efeitos do espalhamento, em virtude da consideração de apenas um grupo de energia.
4. O coeficiente de difusão é aproximado a uma constante.

Além das simplificações listadas, busca-se separar o efeito da reatividade de controle do reator em longa e curta duração. O comportamento de curta duração de um

reator na questão de absorção e fissão pode ser atrelado ao controle do reator, que considera, por exemplo, os efeitos das varetas de controle de um reator e vazão do fluido de arrefecimento, e está na ordem de $10^{-5}s$ a poucos segundos. Já os efeitos de variação da concentração de combustível, assim como a captura de nêutrons pelos venenos, ocorrem na ordem de grandeza do tempo dos decaimentos nucleares desses elementos, em uma escala dada em horas ou dias [Espinosa, 2016]].

Separa-se então a reatividade em duas contribuições, de curta e longa escala:

$$\rho(t) = \rho_c(t) + \rho_l(t) \quad (3.13)$$

onde ρ_c refere-se à reatividade na escala curta de tempo e ρ_l refere-se à escala longa do reator. Considerando os efeitos de longa escala separadamente pode-se escrever a reatividade de longa escala da seguinte forma:

$$\rho_l(t) = \frac{1}{F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \left(\int_0^\infty \chi(E') \nu(E') \delta\Sigma_f(r, E', t) f(r, E') dE' - \delta\Sigma_t(r, E, t) f(r, E) \right) dE d^3r \quad (3.14)$$

sendo neste caso:

$$\delta\Sigma_t(r, E, t) = \delta\Sigma_f(r, E, t) + \delta\Sigma_c(r, E, t), \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \delta\Sigma_c(r, E, t) &= \delta\Sigma_a^{Xe}(r, E, t) + \delta\Sigma_c^{Sm}(r, E, t) \\ &= \sigma_c^{Xe}(E) \delta C_{Xe}(r, t) + \sigma_c^{Sm}(E) \delta C_{Sm}(r, t), \end{aligned} \quad (3.16)$$

e

$$\delta\Sigma_f(r, E, t) = \delta\Sigma_f^{U235}(r, E, t) + \delta\Sigma_f^{Pu}(r, E, t) = \sigma_f^{U235}(E) C_{U235}(r, t) + \sigma_f^{Pu}(E) C_{Pu}(r, t). \quad (3.17)$$

Substituindo as equações 3.14 na 3.13 e posteriormente estas na Equação 3.7 encontra-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n(t) &= \frac{\rho_c(t) - \bar{\beta}}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) \\ &+ \frac{\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \left(\int_0^\infty \chi(E') \nu(E') \delta\Sigma_f(r, E', t) f(r, E') dE' \right) dE d^3r}{\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(r, E) dE d^3r} n(t) \\ &- \frac{\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \delta\Sigma_t(r, E, t) f(r, E) dE d^3r}{\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(r, E) dE d^3r} n(t). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Percebe-se que o tempo médio de geração (Λ) não impacta os fenômenos de longa

duração, ao passo que a velocidade passa a contribuir diretamente, pois define-se :

$$\bar{v} = \frac{1}{\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(r, E) dE d^3r} \quad (3.19)$$

onde \bar{v} é denominada velocidade efetiva.

Para o caso de cinética pontual e monoenergética, pode-se considerar também que:

$$\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \delta \Sigma_t^i(r, E, t) f(r, E) dE d^3r = \delta \Sigma_t(t) \quad (3.20)$$

e

$$\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \int_0^\infty \chi(E') \nu(E') \Sigma_f^i(r, E', t) f(r, E') dE' dE d^3r = \nu \delta \Sigma_f(t) \quad (3.21)$$

obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n(t) = & \frac{\rho_c(t) - \bar{\beta}}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) - [\sigma_c^{Xe} \delta C_{Xe}(t) + \sigma_c^{Sm} \delta C_{Sm}(t)] \bar{v} n(t) \\ & + [(\nu_{Pu} - 1) \sigma_f^{Pu} \delta C_{Pu}(t) - (\nu_u - 1) \sigma_f^{U_{235}} \delta C_{U_{235}}(t)] \bar{v} n(t) \end{aligned} \quad (3.22)$$

Ressalta-se que na equação anterior, tem-se $\delta C_i(t) = C_i(t) - C_i(t_0)$, que consiste na mesma definição apresentada na Equação 3.5, contudo apenas para a concentração do elemento i .

A mesma metodologia pode ser utilizada para a equação de precursores $C(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t} C(r, E, t) = \beta \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) \phi(r, E', t) dE' - \lambda C(r, E, t). \quad (3.23)$$

Multiplicando a Equação 3.23 por $\phi^*(r, E, t_0) \chi_d(E)$ e integrando no espectro de energia e no volume V resulta em:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_V \int_0^\infty \chi_d \phi^*(r, E, t_0) C(r, t) dE d^3r \right) \\ & = \beta \int_V \left\{ \int_0^\infty \chi_d(E) \phi^*(r, E, t_0) dE \right\} \{ \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) f(r, E') d^3r n(t) \\ & - \lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t_0) \chi_d(E) C(r, t) dE d^3r. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Dividindo esta equação por ΛF e aplicando as definições de β e C apresentadas em 3.10 e 3.11 respectivamente, obtém-se:

$$\frac{d}{dt} C(t) = \frac{\bar{\beta}(t)}{\Lambda} n(t) - \lambda C(t). \quad (3.25)$$

3.2 Modelo

O modelo de cinética pontual estendido apresenta não só as equações de densidade de nêutrons e precursores como também as equações dos venenos, transurânicos e do combustível queimado (Urânio-235), resultando em um sistema de nove equações:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}n(t) &= \frac{\rho_c(t) - \bar{\beta}(t)}{\Lambda}n(t) + \lambda C(t) - [\sigma_c^{Xe} \delta C_{Xe}(t) + \sigma_c^{Sm} \delta C_{Sm}(t)] \bar{v}n(t) \\
&+ [(\nu_{Pu} - 1) \sigma_f^{Pu} \delta C_{Pu}(t)] \bar{v}n(t) \\
&- [(\nu_u - 1) \sigma_f^{U235} \delta C_{U235}(t)] \bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C(t) &= \frac{\bar{\beta}(t)}{\Lambda}n(t) - \lambda C(t) \\
\frac{d}{dt}C_I(t) &= -\lambda_I C_I(t) + \left(\gamma_I^U \sigma_f^U C_{U235}(t) + \gamma_I^{Pu} \sigma_f^{Pu} C_{Pu}(t) \right) \bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Xe}(t) &= \lambda_I C_I(t) - \lambda_{Xe} C_{Xe}(t) \\
&+ \left(\gamma_{Xe}^U \sigma_f^U C_{U235}(t) + \gamma_{Xe}^{Pu} \sigma_f^{Pu} C_{Pu}(t) - \sigma_c^{Xe} C_{Xe}(t) \right) \bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Pm}(t) &= -\lambda_{Pm} C_{Pm}(t) + \left(\gamma_{Pm}^U \sigma_f^U C_{U235}(t) + \gamma_{Pm}^{Pu} \sigma_f^{Pu} C_{Pu}(t) \right) \bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Sm}(t) &= \lambda_{Pm} C_{Pm}(t) - \sigma_c^{Sm} C_{Sm}(t) \bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C_{U235}(t) &= -(\sigma_f^{U235} + \sigma_c^{U235}) C_{U235}(t) \bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Np}(t) &= \Sigma_c^{U238} \bar{v}n(t) - \lambda_{Np} C_{Np}(t) - \sigma_c^{Np} C_{Np}(t) \bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Pu}(t) &= \lambda_{Np} C_{Np}(t) - (\sigma_c^{Pu} + \sigma_f^{Pu}) C_{Pu}(t) \bar{v}n(t)
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Analisa-se todo o sistema de geração de venenos e transurânicos a partir da operação do reator e seus efeitos na reatividade e densidade de nêutrons. Percebe-se que há contribuições na ordem de $C_i(t) \bar{v}n(t)$ destes elementos na densidade de nêutrons, em virtude dos termos de $\delta \Sigma_f$ e $\delta \Sigma_c$. Tais contribuições apresentam um comportamento não-linear visto que há, na equação, a presença da densidade de nêutrons e das concentrações dos outros elementos, que por sua vez também dependem da densidade de nêutrons.

3.3 Metodologia Aplicada

Construído o modelo apresentado na Equação 3.26, pode-se escrevê-lo como uma única equação diferencial na forma matricial. Separa-se o lado direito do sistema da Equação 3.27 em duas contribuições, uma linear e outra não-linear.

$$\frac{d}{dt}\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{Y} + \mathbf{N}\mathbf{Y}, \quad (3.27)$$

onde

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} n(t) \\ C(t) \\ C_I(t) \\ C_{Xe}(t) \\ C_{Pm}(t) \\ C_{Sm}(t) \\ C_{U_{235}}(t) \\ C_{Np}(t) \\ C_{Pu}(t) \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Os termos \mathbf{A} e \mathbf{N} são as matrizes dos coeficientes lineares e não-lineares respectivamente, buscando também construir a matriz \mathbf{A} apenas com termos constantes. Percebe-se assim a dependência explícita da densidade de nêutrons na matriz \mathbf{N} . A matriz \mathbf{A} e \mathbf{N} podem ser resumidas da forma:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\rho_c(t) - \bar{\beta}(t)}{\Lambda} & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\bar{\beta}}{\Lambda} & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_I & -\lambda_{Xe} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Pm} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{Pm} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Sigma_c^{U_{238}} \bar{\nu} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Np} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{Np} & 0 \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

e

$$\begin{aligned}
\mathbf{N} = & \begin{bmatrix}
-(\nu_{P_u} - 1)\sigma_f^{P_u}C_{P_u}(t_0) + \sigma_c^{X_e}C_{X_e}(t_0) & 0 & 0 & -\sigma_c^{X_e}n(t) & 0 & -\sigma_c^{S_m}n(t) & -(\nu_u - 1)\sigma_f^{U_{235}}n(t) & 0 & (\nu_{P_u} - 1)\sigma_f^{P_u}n(t) \\
-(\nu_u - 1)\sigma_f^{U_{235}}C_{U_{235}}(t_0) + \sigma_c^{S_m}C_{S_m}(t_0) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma_I^U\sigma_f^U n(t) & 0 & \gamma_I^{P_u}\sigma_f^{P_u}n(t) \\
0 & 0 & 0 & -\sigma_{X_e}n(t) & 0 & 0 & \gamma_{X_e}^U\sigma_f^U n(t) & 0 & \gamma_{X_e}^{P_u}\sigma_f^{P_u}n(t) \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & +\gamma_{P_m}^U\sigma_f^U n(t) & 0 & +\gamma_{P_m}^{P_u}\sigma_f^{P_u}n(t) \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_c^{S_m}n(t) & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_f^{U_{235}}n(t) & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_c^{N_p}n(t) & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -(\sigma_c^{P_u} + \sigma_f^{P_u})n(t)
\end{bmatrix} \bar{v}.
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Esta equação diferencial em forma de matricial é resolvida a partir do método de decomposição de Adomian, descrita mais detalhadamente na subseção seguinte.

3.3.1 Método de Decomposição de Adomian

O método de decomposição de Adomian foi um método desenvolvido por G. Adomian, que consiste em uma aproximação analítica para soluções de uma ampla faixa de equações diferenciais lineares ou não-lineares sem linearização, perturbações, aproximações de fechamento ou métodos de discretização [Adomian, 1988; 1994]. Apesar de ser analítica, ainda consiste em uma aproximação por uma série infinita ($\mathbf{Y}(t) = \sum_{i=0}^{\infty} \mathbf{Y}_i$), que será truncada em algum determinado número de termos J . Ressalta-se que o método se diferencia de demais aproximações por trabalhar diretamente com a equação diferencial inicial, sem utilizar de simplificações excessivas para facilitar a resolução do problema, que contribuem para distanciar o problema matemático do problema físico.

Tal método, explicado mais detalhadamente no Anexo 2, consiste na aproximação de uma solução por uma série infinita em que cada uma destas soluções geradas na série depende das soluções calculadas anteriormente, sendo assim um método recursivo. A primeira solução desta série é obtida a partir da resolução de um sistema homogêneo com condição inicial, contudo sem a contribuição não-linear. As demais soluções são obtidas resolvendo o mesmo sistema, contudo adicionando o termo não-linear como um termo fonte, calculado a partir das soluções já previamente obtidas. Para este trabalho, a solução inicial é obtida a partir do seguinte sistema:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \mathbf{Y}_0 = \mathbf{A} \mathbf{Y}_0 \\ \mathbf{Y}_0(0) = \mathbf{Y}_I \end{cases}, \quad (3.31)$$

onde \mathbf{Y}_0 é a solução inicial do sistema sem fonte com condições iniciais não homogêneas \mathbf{Y}_I . Este sistema tem solução analítica na forma:

$$\mathbf{Y}_0(t) = \exp(\mathbf{A}t) \mathbf{Y}_I. \quad (3.32)$$

Os sistemas seguintes passam a considerar a contribuição não-linear, aproximando-

a como um termo fonte da forma \mathbf{F}_j onde $j = 1 : J$, sendo apresentados da seguinte forma:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\mathbf{Y}_j = \mathbf{A}\mathbf{Y}_j + \mathbf{F}_j \\ \mathbf{Y}_j(\mathbf{0}) = 0 \end{cases}, \quad (3.33)$$

cuja solução analítica já existe na literatura [Boyce e DiPrima, 2001] e é apresentada a seguir:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_j(\mathbf{t}) &= \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{Y}_j(\mathbf{0}) + \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t-\tau))\mathbf{F}_j(\tau)d\tau \\ &= \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{0} + \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t-\tau))\mathbf{F}_j(\tau)d\tau \\ &= \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t-\tau))\mathbf{F}_j(\tau)d\tau \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde \mathbf{F}_j é definido a partir das soluções das recursões anteriores:

$$\mathbf{F}_j(\mathbf{t}) = \mathbf{F}_j(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_{j-1}), \quad (3.35)$$

e pode ser obtido a partir de polinômios específicos chamados de Polinômios de Adomian. Uma vez que a série de \mathbf{Y}_j é convergente [Rudin, 1976], pode-se escolher truncar a solução em um número j finito de termos onde a solução já esteja suficientemente precisa dentro de um limite desejado. Os polinômios de Adomian podem ser calculados a partir da seguinte equação [Adomian, 1988; 1994]:

$$A_{k,j} = \frac{1}{j!} \left[\frac{d^j}{dw^j} N_k \left(\sum_{k=0}^j y_k w^k \right) \right] \Bigg|_{w=0}, \quad (3.36)$$

onde j consiste na respectiva recursão do método de adomian (e conseqüentemente a j -ésima solução). Há diversas maneiras de se criar estes polinômios, por exemplo, a formulação para termos multivariáveis (os termos não-lineares) é diferente dos dependentes de apenas uma variável.

Neste trabalho, tem-se dois tipos de polinômios em virtude da existência de dois tipos de contribuições, visto que $\delta C_i(t)n(t)$ é decomposto em uma parte não-linear $C_i(t)n(t)$ e outra dependente apenas da densidade de nêutrons $C_i(t_0)n(t)$. Os termos não-lineares presentes são consequência da absorção de nêutrons pelos venenos, queima do combustível existente (U-235) e geração de nêutrons pela fissão do Pu-239 produzido ao decorrer da operação do reator. Os termos lineares correspondem às contribuições das concentrações iniciais do sistema, que são necessárias para se definir um tempo inicial t_0 , além de

demais termos que serão adicionados posteriormente para ajudar a estabilizar o código computacional.

A formulação do polinômio de adomian para o termo linear dentro do vetor **NY** fica da forma:

$$N(n) = C_i(t_0)n, \quad (3.37)$$

obviamente o termo $C_i(t_0)$ é uma constante, não tem influência na geração do polinômio e será omitido na formulação a seguir:

$$\begin{aligned} P_0^i &= N(n_0) = n_0, \\ P_1^i &= \frac{d}{dw}(n_1w)|_{w=0} = n_1 \\ P_2^i &= \frac{1}{2!} \frac{d^2}{dw^2}(n_2w^2)|_{w=0} = n_2 \\ P_3^i &= \frac{1}{3!} \frac{d^3}{dw^3}(n_3w^3)|_{w=0} = n_3 \end{aligned} \quad (3.38)$$

Tem-se então que neste caso da contribuição linear, apenas o termo condizente à recursão é utilizado para gerar o polinômio. Nota-se também um padrão nestes polinômios, sendo descritos a partir da Equação 3.36, que neste caso voltará a considerar as constantes das concentrações isotópicas, por conveniência.

$$P_j^i = C_i(t_0)n_j. \quad (3.39)$$

Os termos não-lineares seguem a mesma metodologia, contudo parte-se da definição:

$$N(C_i, n) = C_i n, \quad (3.40)$$

o que resulta em polinômios da seguinte forma:

$$\begin{aligned} A_0^i &= N(C_i^0, n_0) = C_i^0 n_0, \\ A_1^i &= \frac{d}{dw}((C_i^0 + C_i^1 w)(n_0 + n_1 w))|_{w=0} = C_i^0 n_1 + C_i^1 n_0, \\ A_2^i &= \frac{1}{2} \frac{d}{dw}((C_i^1 + 2C_i^2 w)(n_0 + n_1 w) + (C_i^0 + C_i^1 w)(n_1 + 2n_2 w))|_{w=0} \\ &= C_i^0 n_2 + C_i^1 n_1 + C_i^2 n_0, \\ A_3^i &= \frac{1}{3} \frac{d}{dw}((C_i^2 + 3C_i^3 w)(n_0 + n_1 w) + (C_i^1 + 2C_i^2 w)(n_1 + 2n_2 w) + \\ &\quad + (C_i^0 + C_i^1 w)(n_2 + 3n_3 w))|_{w=0} = C_i^0 n_3 + C_i^1 n_2 + C_i^2 n_1 + C_i^3 n_0, \end{aligned} \quad (3.41)$$

Analisando o comportamento dessa série de polinômios, pode-se concluir que todos

estes seguem uma mesma estrutura:

$$A_j^i = \sum_{m=0}^j C_i^{j-m} n_m, \quad (3.42)$$

onde A_j^i consiste no j -ésimo polinômio do nuclídeo i .

Pode-se então, por conveniência, escrever matricialmente os polinômios de Adomian $\mathbf{F}_j(\mathbf{t})$ a partir de duas contribuições, linear e não-linear:

$$\mathbf{F}_j = \mathbf{FN}_1 + \mathbf{FN}_2, \quad (3.43)$$

onde:

$$\mathbf{FN}_1 = \begin{bmatrix} (\nu_u - 1)\sigma_f^{U_{235}} P_j^{U_{235}} + \sigma_c^{Xe} P_j^{Xe} + \sigma_c^{Sm} P_j^{Sm} - (\nu_{Pu} - 1)\sigma_f^{Pu} P_j^{Pu} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \bar{v} \quad (3.44)$$

e

$$\mathbf{FN}_2 = \begin{bmatrix} (\nu_{Pu} - 1)\sigma_f^{Pu} A_j^{Pu} - (\nu_u - 1)\sigma_f^{U_{235}} A_j^{U_{235}} - \sigma_c^{Xe} A_j^{Xe} - \sigma_c^{Sm} A_j^{Sm} \\ 0 \\ \left(\gamma_I^U \sigma_f^U A_j^{U_{235}} + \gamma_I^{Pu} \sigma_f^{Pu} A_j^{Pu} \right) \\ \left(\gamma_{Xe}^U \sigma_f^U A_j^{U_{235}} + \gamma_{Xe}^{Pu} \sigma_f^{Pu} A_j^{Pu} - \sigma_c^{Xe} A_j^{Xe} \right) \\ \left(\gamma_{Pm}^U \sigma_f^U A_j^{U_{235}} + \gamma_{Pm}^{Pu} \sigma_f^{Pu} A_j^{Pu} \right) \\ -\sigma_c^{Sm} A_j^{Sm} \\ -\sigma_f^{U_{235}} A_j^{U_{235}} \\ -\sigma_c^{Np} A_j^{Np} \\ -(\sigma_c^{Pu} + \sigma_f^{Pu}) A_j^{Pu} \end{bmatrix} \bar{v}. \quad (3.45)$$

3.3.2 Discretização do tempo

Apesar da metodologia fornecer uma resposta analítica, utilizou-se uma rotina de cálculo numérico com discretização do tempo, pela dificuldade de se calcular a exponencial de uma matriz e suas integrais. Este problema é recorrente na literatura e há diversos métodos para abordá-lo já publicados, contudo sempre apresentando alguma instabilidade, imprecisão ou limitação dos problemas em que podem ser aplicados [Moler e Loan, 2003]. Vários softwares comerciais possuem rotinas específicas já implementadas para resolver discretamente os valores destas exponenciais de matrizes. As integrais, por sua vez, foram resolvidas a partir do método de integração por trapézios.

$$\int_a^b f(x)dx = \left(\frac{b-a}{2}\right)[f(b) + f(a)] \quad (3.46)$$

3.3.3 Manipulação matricial

A condição de *stiffness* da matriz, quando seus termos variam em muitas ordens de grandeza entre si, aumenta ainda mais a dificuldade de se calcular as exponenciais destas matrizes, por erros causados por truncamento e arredondamento dos valores representados como ponto flutuante pelo computador. Tais dificuldades resultaram na necessidade de buscar-se soluções para facilitar o máximo possível a modelagem matemática assim como o cálculo computacional.

O presente trabalho buscou aplicar o método apresentado por Silva, 2013 em que se busca contornar o problema de rigidez do sistema diagonalizando-o. Procurou-se então diagonalizar a matriz principal \mathbf{A} , que aparece recursivamente como um argumento da exponencial, contudo esta é singular e torna-se inviável tal método. Optou-se por inserir termos artificiais nos termos nulos na diagonal principal a fim de evitar a existência de uma matriz singular, subtraindo estes termos no vetor \mathbf{NY} . Os termos extras adicionados são fisicamente interpretados como decaimentos fictícios dos elementos Samário-149, Urânio-235 e Plutônio-239. Vale ressaltar que apesar de que o Urânio-235 e Plutônio-239 já apresentarem o seu próprio decaimento real, foi escolhido superestima-los para valores próximos dos outros valores das diagonais principais, evitando agravar o problema de *stiffness* da matriz.

Os termos fora da diagonal da matriz \mathbf{A} também são transferidos para a contribui-

ção no vetor \mathbf{NY} . Contudo houve a necessidade de manter os termos (λ) e $(\frac{\bar{\beta}}{\Lambda})$ na matriz \mathbf{A} para evitar que o comportamento da reatividade nas soluções iniciais seja dominado apenas pelo termo $(\frac{\rho_c(t)-\bar{\beta}(t)}{\Lambda})$, que resultaria em uma perda superestimada da densidade de nêutrons e nas soluções do sistema, em virtude do modelo numérico e como ele é desenvolvido no método utilizado.

A matriz \mathbf{A} fica representada então na forma:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{\rho_c(t)-\bar{\beta}(t)}{\Lambda} & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\bar{\beta}}{\Lambda} & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Xe} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Pm} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Sm^*} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{U^*} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Np} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Pu^*} \end{bmatrix}, \quad (3.47)$$

onde λ_{Sm^*} corresponde ao decaimento fictício do Sm-149, λ_{U^*} corresponde ao decaimento fictício superestimado do U-235 e λ_{Pu^*} é decaimento fictício superestimado do Pu-239. Para não haver alteração do resultado nas soluções deve-se também subtrair a mesma quantidade, inserida agora dentro do termo \mathbf{NY} . Como a contribuição destes termos é da forma $\lambda_i C_i(t)$, sua contribuição se enquadra como uma parcela linear, podendo ser descrita de forma semelhante aos polinômios de Adomian na Equação 3.38, contudo tendo a variável $C_i(t)$ em vez de $n(t)$:

$$B_j^i = C_j^i(t), \quad (3.48)$$

onde B_j^i é o polinômio de Adomian para a j -ésima recursão para o nuclídeo i .

Sendo inseridas diretamente no vetor \mathbf{NY}_1 :

$$\mathbf{FN}_1 = \begin{bmatrix} \bar{v} \left[(\nu_u - 1) \sigma_f^{U_{235}} P_j^{U_{235}} + \sigma_c^{Xe} P_j^{Xe} + \sigma_c^{Sm} P_j^{Sm} - (\nu_{Pu} - 1) \sigma_f^{Pu} P_j^{Pu} \right] \\ 0 \\ 0 \\ \lambda_I B_j^I \\ 0 \\ \lambda_{Pm} B_j^{Pm} + \lambda_{Sm^*} B_j^{Sm} \\ \lambda_{U^*} B_j^U \\ \Sigma_c^{U_{238}} \bar{v} B_j^{U_{238}} \\ \lambda_{Np} B_j^{Np} + \lambda_{Pu^*} B_j^{Pu} \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

Com a possibilidade de diagonalização, busca-se escrever a exponencial presente na solução do primeiro sistema sem fonte com condições iniciais não homogêneas:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_0 &= \exp(\mathbf{A}t) \mathbf{Y}_I \\ &= \mathbf{V} \exp(\mathbf{D}t) \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Y}_I, \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde \mathbf{V} é a matriz com os autovetores da matriz \mathbf{A} , \mathbf{V}^{-1} é a matriz inversa de \mathbf{V} , enquanto \mathbf{D} é a matriz diagonal com os autovalores de \mathbf{A} . O mesmo pode ser feito para as demais soluções das recursões seguintes:

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_j &= \int_0^\infty \exp(\mathbf{A}(t - \tau)) \cdot \mathbf{F}_j(\tau) \\ &= \mathbf{V} \int_0^\infty \exp(\mathbf{D}(t - \tau)) \mathbf{V}^{-1} \cdot \mathbf{F}_j(\tau) \end{aligned} \quad (3.51)$$

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos da aplicação da metodologia descrita no capítulo anterior para a cinética pontual de um reator nuclear assim como análise de erros, teste de convergência e independência de malha. Buscou-se avaliar o comportamento do reator e a influência dos venenos e transurânicos na reatividade e consequentemente na população de nêutrons, tendo parâmetros de operação predeterminados. Estudou-se dois casos: o caso A em que se configura o desligamento de um reator e o caso B em que o reator parte inicialmente do estado de criticalidade. Ambos os casos foram analisados considerando elementos novos e usados no combustível. As constantes utilizadas para a simulação dos casos comentados são [Nichols et al., 2008]:

$$\begin{array}{llll}
 \beta = 0,0065, & \gamma_I^U = 0,0629, & \sigma_c^{Xe} = 2,6 \cdot 10^{-18} & [cm^2], \\
 \Lambda = 2,7778 \cdot 10^{-8} & [h], \gamma_{Xe}^U = 0,003, & \sigma_c^{Sm} = 4,1 \cdot 10^{-20} & [cm^2], \\
 \lambda = 278,68 & [h^{-1}], \gamma_{Pm}^U = 0,010816, & \sigma_f^U = 582,6 \cdot 10^{-24} & [cm^2], \\
 \lambda_I = 0,1055 & [h^{-1}], \gamma_I^{Pu} = 0,06535, & \sigma_f^{Pu} = 747,3 \cdot 10^{-24} & [cm^2], \\
 \lambda_{Xe} = 0,0762 & [h^{-1}], \gamma_{Xe}^{Pu} = 0,010763, & \sigma_c^{U235} = 98,8 \cdot 10^{-24} & [cm^2], \\
 \lambda_{Pm} = 0,013054 & [h^{-1}], \gamma_{Pm}^{Pu} = 0,012175, & \sigma_c^{U238} = 2,719 \cdot 10^{-24} & [cm^2], \\
 \lambda_{Np} = 0,0123 & [h^{-1}], \epsilon = 0,03, & \sigma_c^{Np} = 68 \cdot 10^{-24} & [cm^2], \\
 \lambda_U^* = 0,001 & [h^{-1}], \nu_{Pu} = 2,8836, & \bar{\nu} = 1,1035 \cdot 10^7 & [cm/h], \\
 \lambda_{Sm}^* = 0,03 & [h^{-1}], \nu_U = 2,439, & \lambda_{Pu}^* = 0,04 & [h^{-1}]
 \end{array}$$

onde ϵ é o enriquecimento percentual do Urânio-235 da massa total do combustível.

4.1 Combustível novo

4.1.1 Caso A: Reator desligando

No primeiro caso estudado, buscou-se comparar a metodologia com outros casos presentes na literatura [Espinosa, 2016] e configurou-se a reatividade de curta escala em uma ordem de grandeza considerável e negativa ($\rho_c = -0,0001$), buscando simular um reator nuclear em desligamento. Este processo ocorre com frequência nas usinas nucleares para haver manutenção de equipamentos e troca de combustíveis exauridos. Os valores

escolhidos para as condições iniciais neste caso se assemelham aos apresentados por Espinosa, 2016 com combustível novo e não necessariamente representam as propriedades de um reator. Os valores são apresentados abaixo, em cm^{-3} :

$$\begin{aligned}
 n(t_0) &= 1.2 \cdot 10^{10} \\
 C(t_0) &= 10^{13} \\
 C_I(t_0) &= 0 \\
 C_{Xe}(t_0) &= 0 \\
 C_{Pm}(t_0) &= 0 \\
 C_{Sm}(t_0) &= 0 \\
 C_U(t_0) &= 3 \cdot 10^{19} \\
 C_{Np}(t_0) &= 0 \\
 C_{Pu}(t_0) &= 0
 \end{aligned}$$

As figuras seguintes apresentam a concentração de alguns elementos do vetor \mathbf{Y} ao longo do tempo, dado em horas. Ressalta-se que o período de tempo apresentado nas figuras difere um dos outros, em virtude das diferentes velocidades dos processos associados a diferentes elementos.

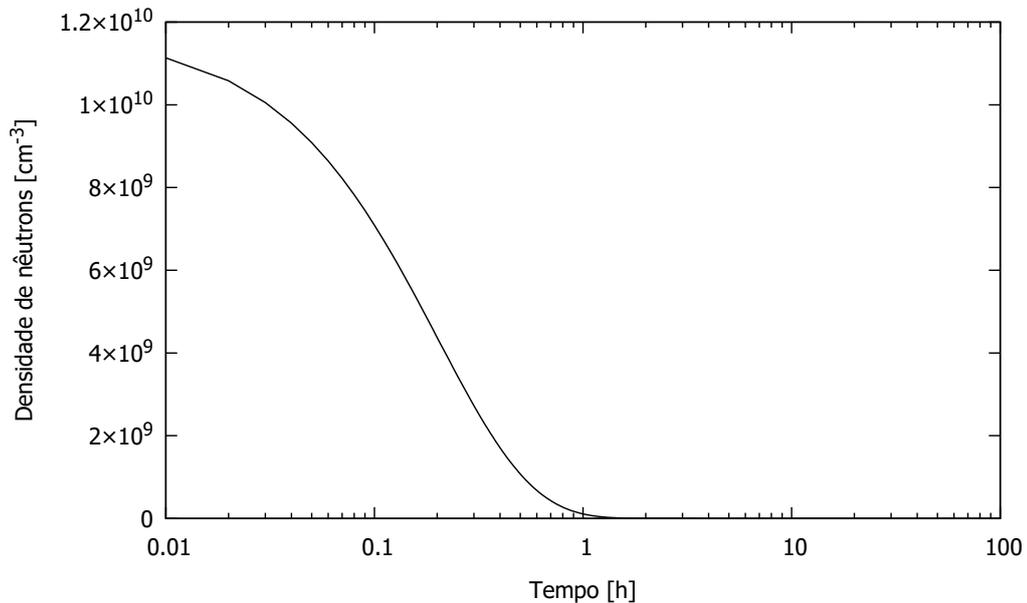


Figura 4.1 – Densidade de nêutrons com $\rho_c = -0,0001$.

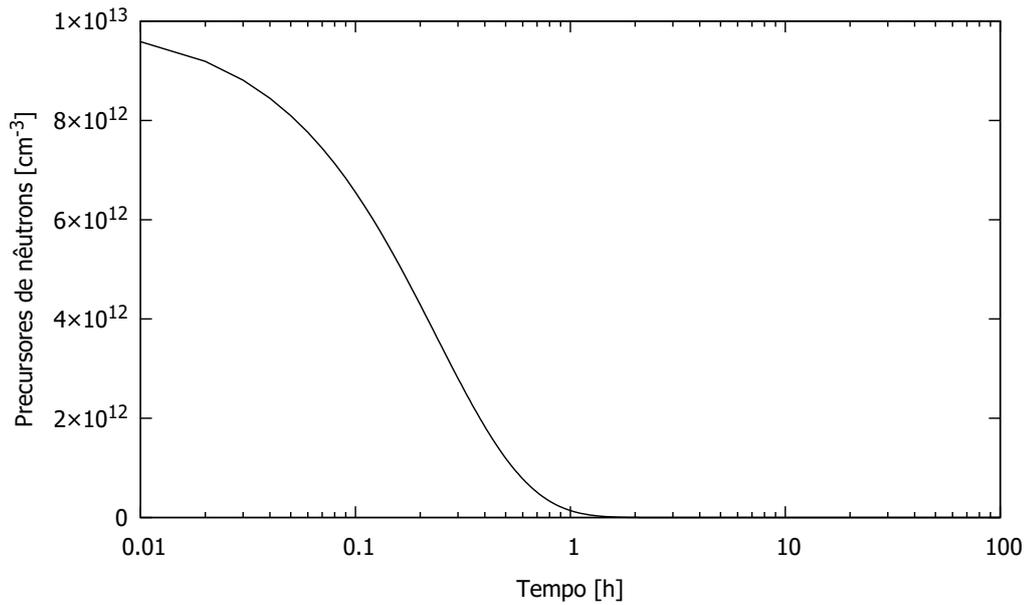


Figura 4.2 – Concentração de precursores com $\rho_c = -0,0001$.

Pode-se observar nas Figuras 4.1 e 4.2 a densidade de nêutrons e a concentração de precursores dentro do reator. Em ambos os gráficos pode-se notar um rápido declínio, consequência da reatividade negativa, resultando no desligamento do reator em poucas horas. Ambos os elementos apresentam comportamentos parecidos, sendo interdependentes, contudo têm ordens de grandeza diferentes, em virtude de suas diferentes proporções no equilíbrio, estado anterior ao ser inserido na reatividade subcrítica. O efeito dos parâmetros de controle do reator, neste caso, é dominante no sistema e não é possível analisar detalhadamente o efeito dos venenos e transurânicos no reator, visto que a população de nêutrons decai rapidamente e junto dela a contribuição não linear na reatividade causada por estes subprodutos. Apresentam-se as concentrações dos venenos ao se desligar o reator:

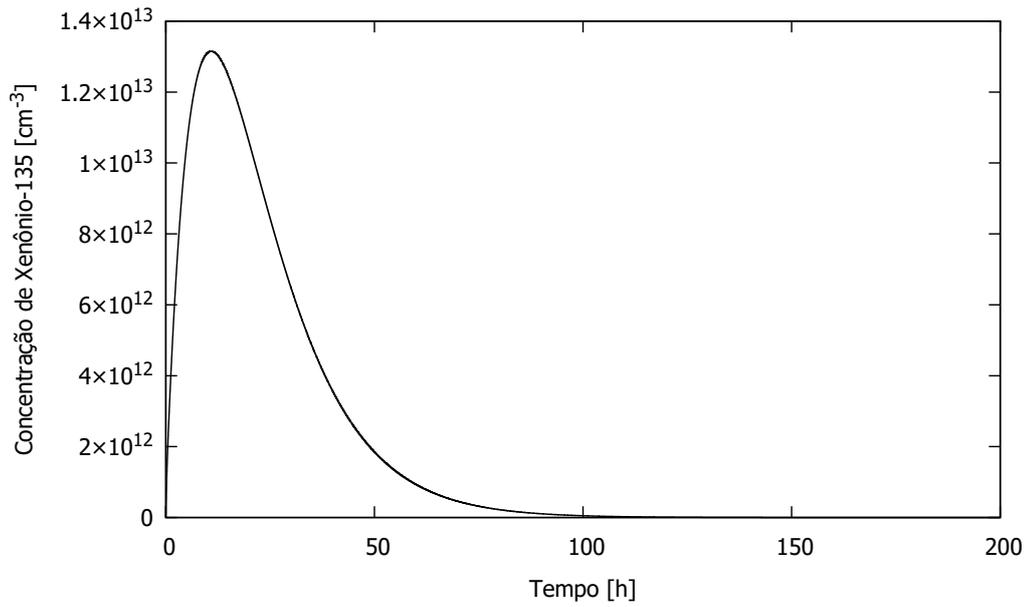


Figura 4.3 – Concentração do Xenônio-135 com $\rho_c = -0,0001$.

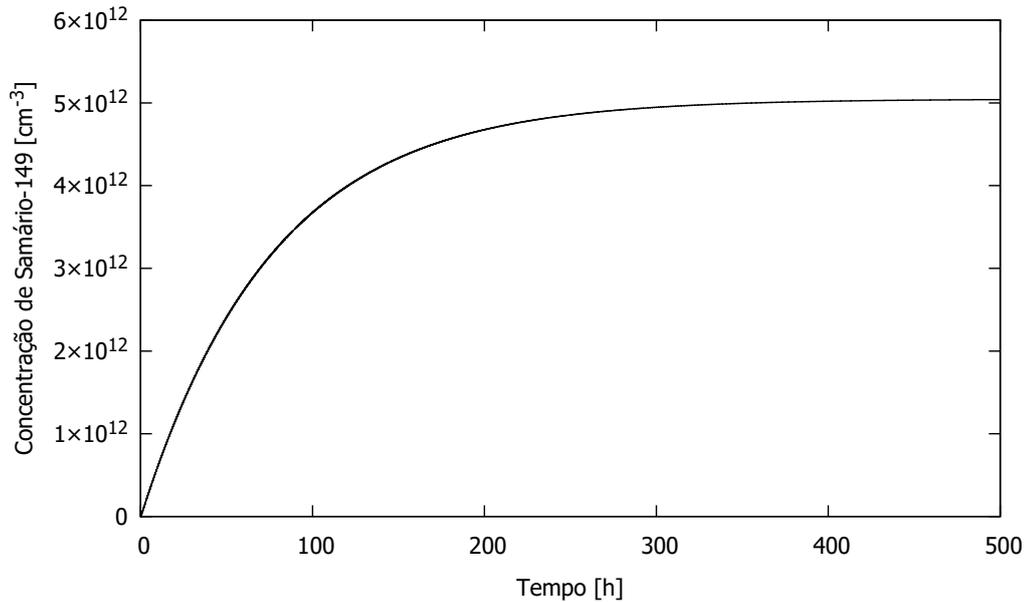


Figura 4.4 – Concentração de Samário-149 com $\rho_c = -0,0001$.

A concentração do Xe-135 neste caso apresenta um crescimento durante e após o desligamento do reator, em virtude da geração direta pela fissão, assim como pelo decaimento do I-135, atingindo um pico aproximadamente dez horas após não haver praticamente mais nêutrons no reator. A partir deste momento a concentração de I-135 é insuficiente para manter a quantidade de Xe-135 e este passa a reduzir pelo próprio

decaimento. Apesar do pico do Xe-135 ser em dez horas após o reator desligar, sua concentração permanece significativa por quase 72 horas no reator. Evitar a necessidade de se fornecer nêutrons extras para compensar o efeito deste veneno é uma das principais razões pela qual espera-se no mínimo três dias para se religar um reator recém parado. As concentrações de I-135 e Pm-149 apresentam um comportamento semelhante ao Xe-135 e estão dispostas no Apêndice A.

A concentração de Sm-149 descrita na Figura 4.4, por sua vez, apresenta um comportamento diferente, tendendo a um valor constante ao decorrer do tempo. Por ser um elemento estável, sua redução só aconteceria em virtude da absorção de nêutrons. Como o reator não apresenta praticamente mais nêutrons depois de algumas horas, o Sm-149 tende a aumentar sua concentração até que o Pm-149 tenha decaído completamente, o que demora em torno de 400 horas.

Analisando também o efeito de queima do combustível (Figura 4.5), pode-se observar que há uma redução da concentração do U-235 enquanto ainda há presença de nêutrons no reator devido a fissão, contudo permanece constante após o reator desligar. Esta aproximação é esperada visto que considerou-se o U-235 praticamente estável nesta escala de tempo. A queima total observada é muito pequena devido ao pequeno tempo de operação.

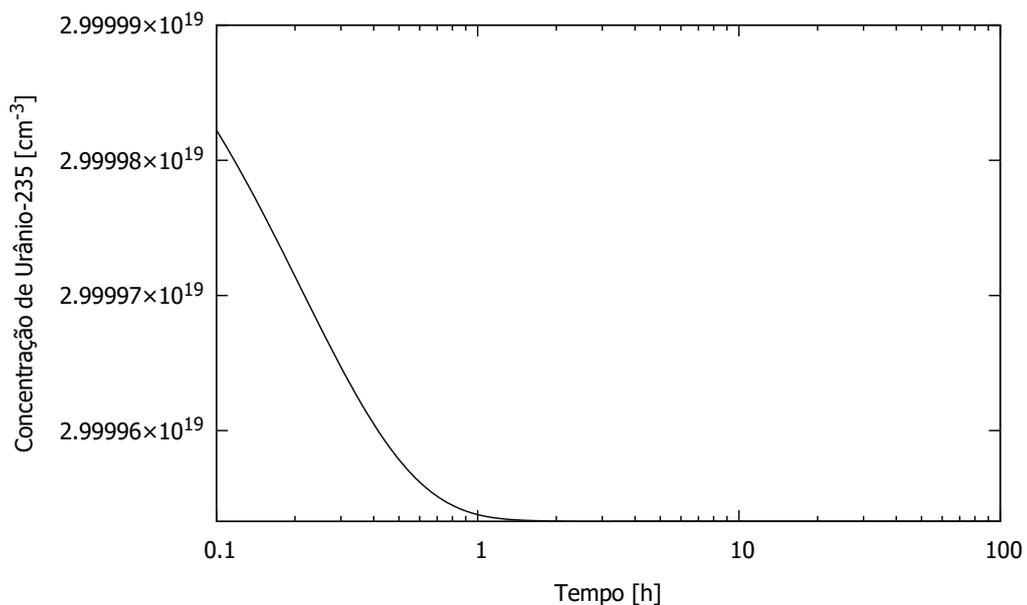


Figura 4.5 – Concentração de Urânio-235 com $\rho_c = -0,0001$.

A concentração de Np-239 e Pu-239 também apresenta um comportamento pa-

recido ao Pm-149 e Sm-149 neste caso, visto que apesar dos primeiros dependerem da captura e não da fissão para serem gerados, dependem também da densidade de nêutrons para ocorrer. Ressalta-se que durante o período aproximado de 23 dias, Np-239 varia praticamente uma ordem de grandeza. A hipótese de que o Pu-239 é estável, em virtude de seu decaimento muito lento, faz com que ele tenda a um valor constante diferente de zero na simulação do reator nuclear em desligamento, semelhante ao Sm-149. A escala de tempo para a estabilidade do Pu-239 e Sm-149 é praticamente a mesma visto que os elementos geradores apresentam tempos de decaimentos similares.

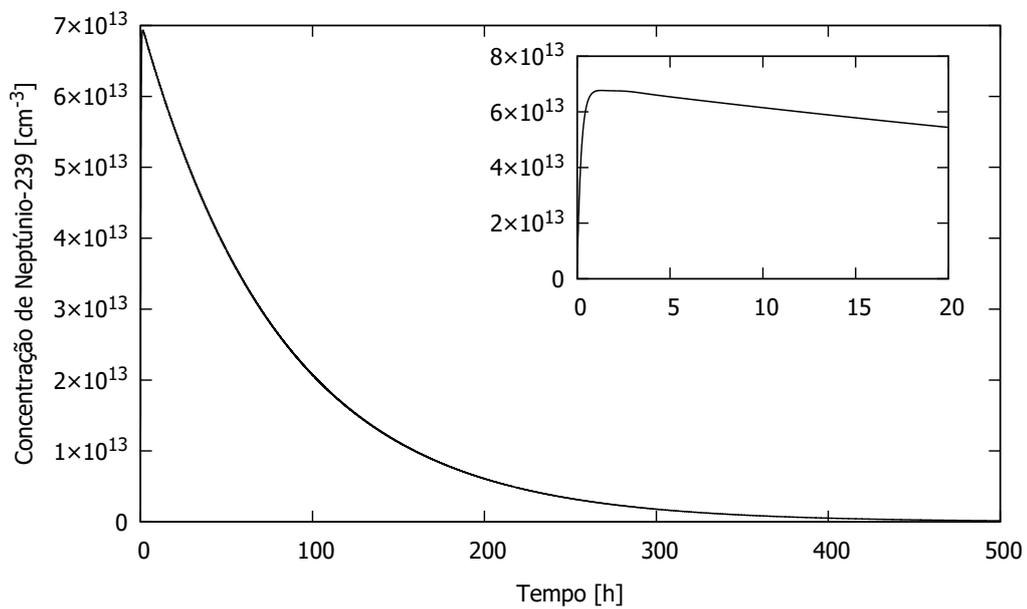


Figura 4.6 – Concentração de Neptúncio-239 com $\rho_c = -0,0001$.

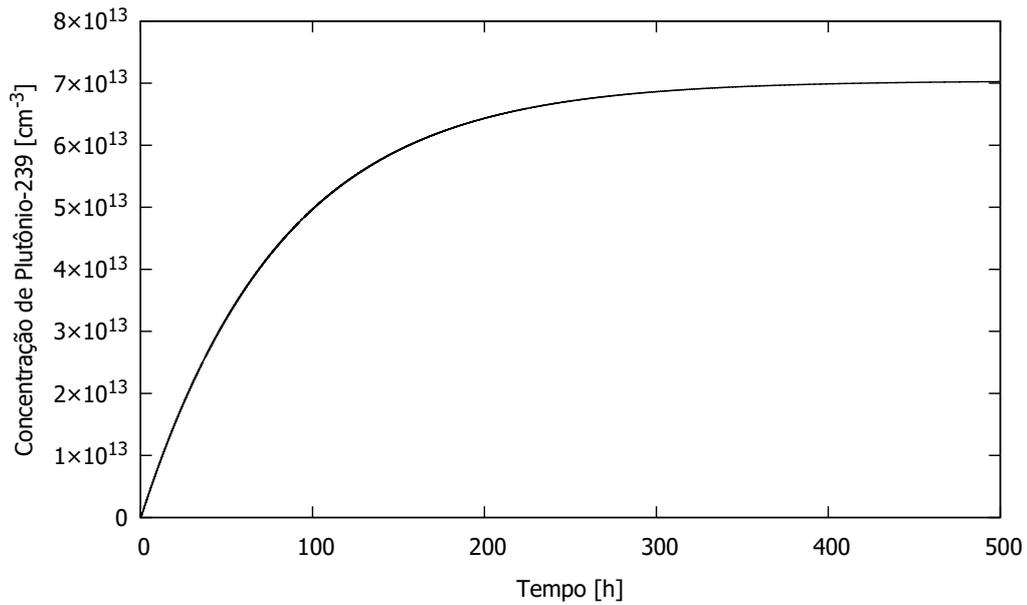


Figura 4.7 – Concentração de Plutônio-239 com $\rho_c = -0,0001$.

Neste caso pode-se analisar o comportamento de um reator desligando e a geração de novos elementos. O atraso observado entre o reator e as concentrações dos demais elementos é evidente em virtude dos tempos de decaimento destes, ocorrendo na ordem de 10^1 à 10^4 horas. Os resultados encontrados apresentam valores e comportamentos semelhantes aos encontrados na literatura [Espinosa, 2016] assim como o esperado fisicamente do problema, indicando uma consistência no código e nas novas considerações utilizadas. Contudo o comportamento não-linear da interação dos venenos e transurânicos na reatividade não pode ser observado, visto que praticamente não há mais nêutrons livres no reator, sendo necessário considerar um caso em que o reator opera por mais tempo para ser possível analisar esse sistema em sua plenitude.

4.1.2 Caso B: Reator em operação

Considerou-se um caso em que a reatividade de curta escala seja definida como nula ($\rho_c = 0$). A interpretação física deste caso seria de um reator sendo regulado para se manter no estado crítico, contudo desconsiderando neste controle os efeitos da alteração da composição do reator.

Apesar das implementações citadas no capítulo anterior, o modelo ainda apresenta grande instabilidade quando se utiliza parâmetros usualmente escolhidos em simulações

de cinética pontual. Tal instabilidade é atribuída à dificuldade de se lidar e calcular computacionalmente sistemas com alta *stiffness*, gerando erros aritméticos resultantes da falta de precisão e critérios de truncamento dos números representados por uma quantidade fixa de *bits*. Este tipo de problema é recorrente em modelos de cinética pontual quando se trabalha com diversos grupos de precursores. Neste caso é causado pela existência de duas escalas de tempo. A necessidade do método em se calcular as exponenciais destas matrizes que apresentam rigidez e integrá-las acarreta em um nível ainda mais elevado de complexidade no problema. Não houve tempo para estudar detalhes destas questões aritméticas, então optou-se por utilizar valores para os parâmetros de operação em que a simulação apresenta estabilidade, analisando os efeitos dos transurânicos e venenos na densidade de nêutrons em um reator operando em longa escala de tempo.

Em reatores nucleares, a faixa de valores esperados normalmente para a concentração total de urânio e fluxo de nêutrons são na ordem de 10^{22} [átomos/ cm^3] e 10^{14} [nêutrons/ $cm^2 \cdot s$] respectivamente. Entretanto, o algoritmo desenvolvido apresentou estabilidade apenas até 10^{18} [átomos/ cm^3] para a concentração de urânio total ($C_{U_{tot}}$) e 10^8 [nêutrons/ cm^3] para a densidade de nêutrons. A concentração total pode ser descrita segundo a Equação 4.1 :

$$C_{U_{tot}}(t) = C_{U_{235}}(t) + C_{U_{238}}(t). \quad (4.1)$$

Inicialmente optou-se por variar a concentração total dos átomos de urânio total, permanecendo a mesma proporção de enriquecimento, flutuando entre 10^{15} à 10^{18} [átomos/ cm^3]. O objetivo deste estudo é apresentar uma análise qualitativa do comportamento e efeitos dos venenos e transurânicos na reatividade, analisando a tendência das curvas quando as concentrações de urânio tendem à valores esperados em reatores nucleares, contudo ainda na faixa de estabilidade do algoritmo desenvolvido.

As concentrações iniciais utilizadas nesta simulação são:

$$\begin{aligned}
 n(t_0) &= 1,2 \cdot 10^8 \\
 C(t_0) &= 10^{11} \\
 C_I(t_0) &= 0 \\
 C_{Xe}(t_0) &= 0 \\
 C_{Pm}(t_0) &= 0 \quad , \\
 C_{Sm}(t_0) &= 0 \\
 C_U(t_0) &= 3 \cdot 10^\alpha \\
 C_{Np}(t_0) &= 0 \\
 C_{Pu}(t_0) &= 0
 \end{aligned}$$

onde α varia de 15 a 18, dependendo da simulação.

Nas Figuras 4.8 e 4.9 podem-se ver os efeitos combinados dos venenos e transurânicos na densidade de nêutrons e concentração de precursores.

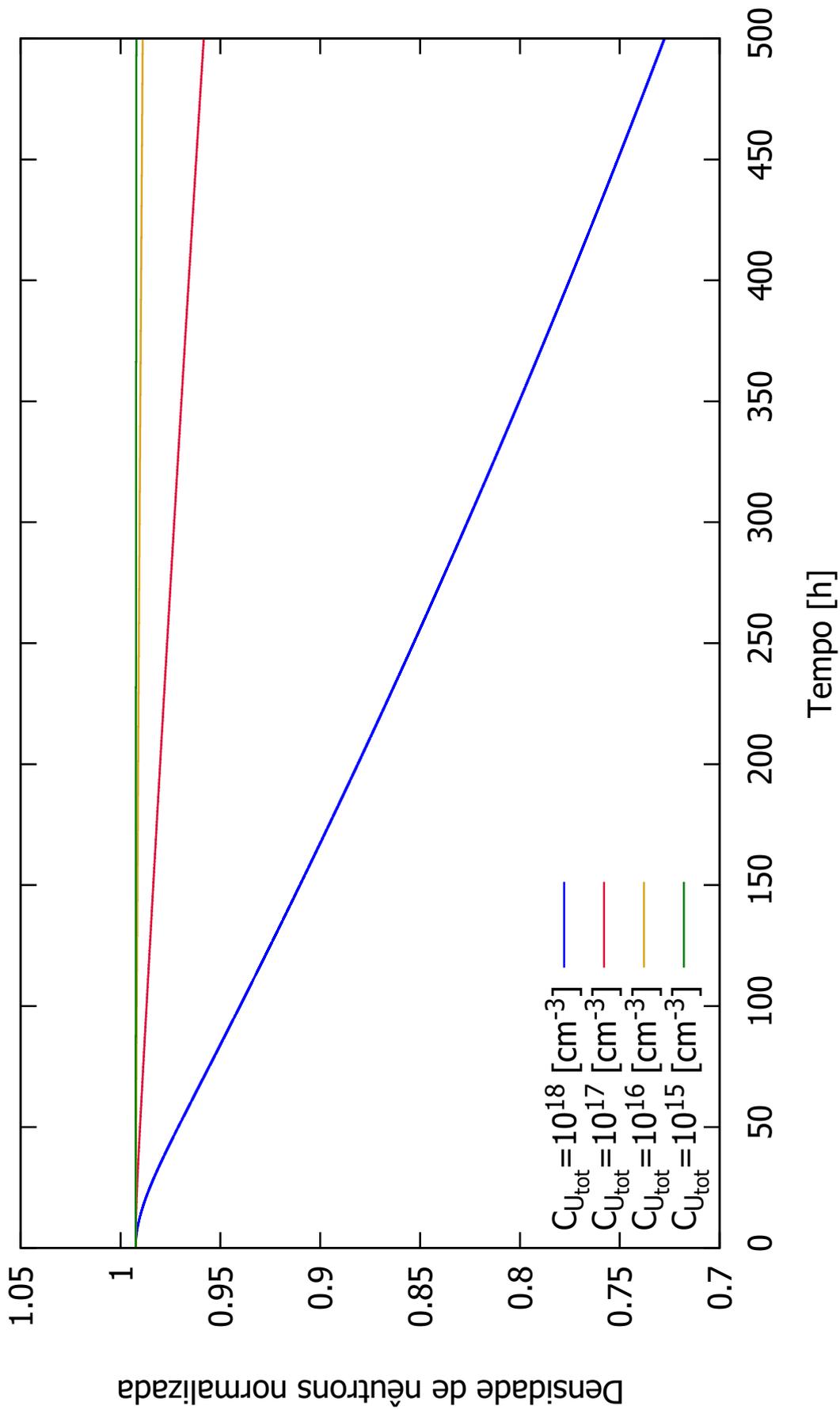


Figura 4.8 – Densidade de nêutrons com $\rho_c = 0$.

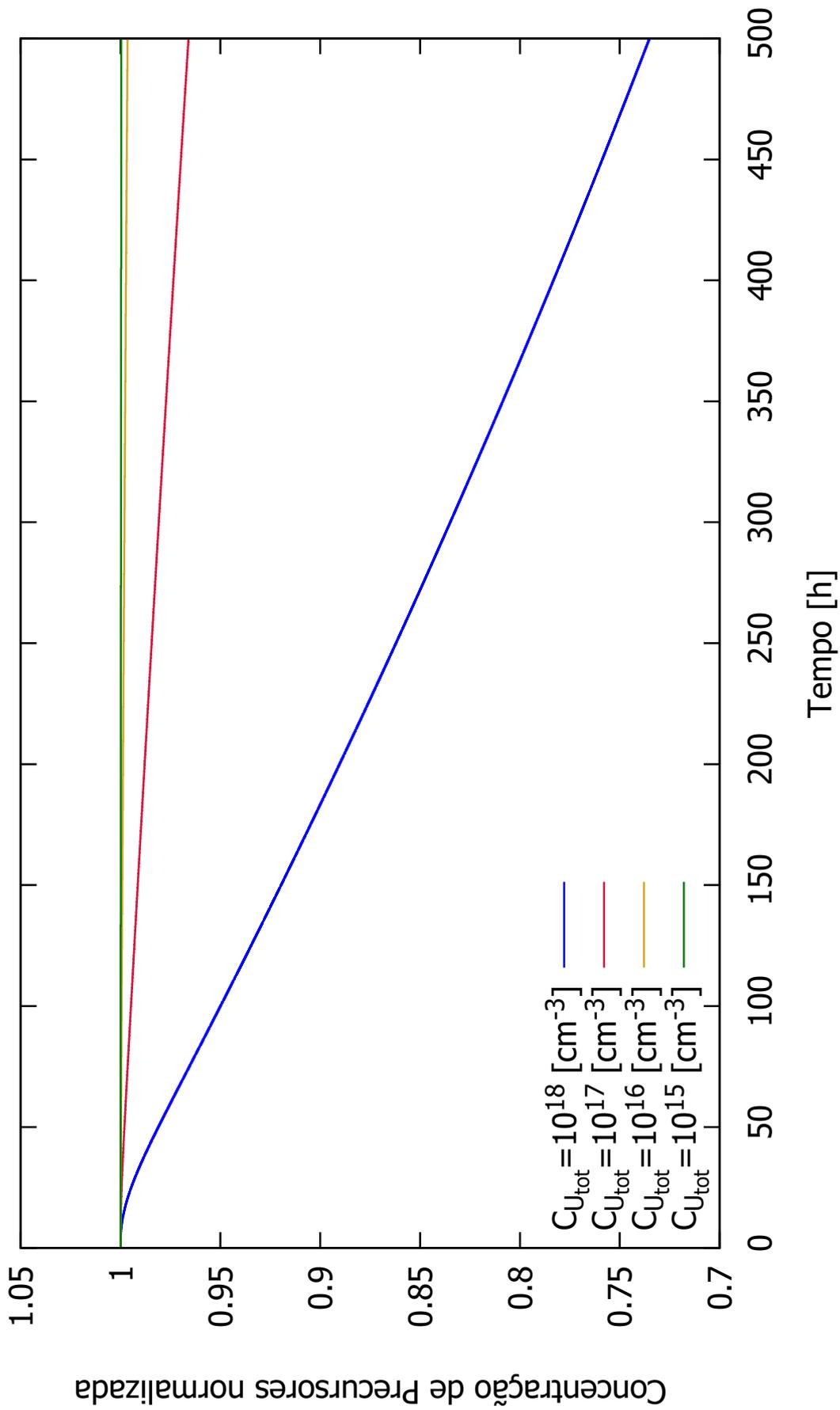


Figura 4.9 – Concentração de precursores com $\rho_e = 0$.

Percebe-se que o aumento da concentração de urânio no reator, neste caso, acarreta em uma diminuição da reatividade, e conseqüentemente na densidade de nêutrons e precursores, o que é contra intuitivo. Tal efeito é explicado pelo fato de que neste modelo a reatividade do reator foi predeterminada, desvinculando-a do efeito de se adicionar maiores concentrações de combustível, contudo a concentração de U-235 e U-238 estão influenciando a reatividade através da sua queima e na produção de venenos e transurânicos. Nota-se também que, nesta escala de tempo, os venenos e a queima do combustível ainda apresentam uma participação dominante nos efeitos do reator em comparação aos transurânicos, visto que a reatividade reduz com a progressão temporal da simulação.

Os efeitos nas concentrações dos venenos e demais elementos podem ser analisados nas figuras a seguir. Como estes subprodutos estão diretamente e proporcionalmente relacionados à concentração de Urânio-235, que nesta simulação varia em ordens de grandeza, optou-se por normalizar as curvas para ser possível comparar estes efeitos.

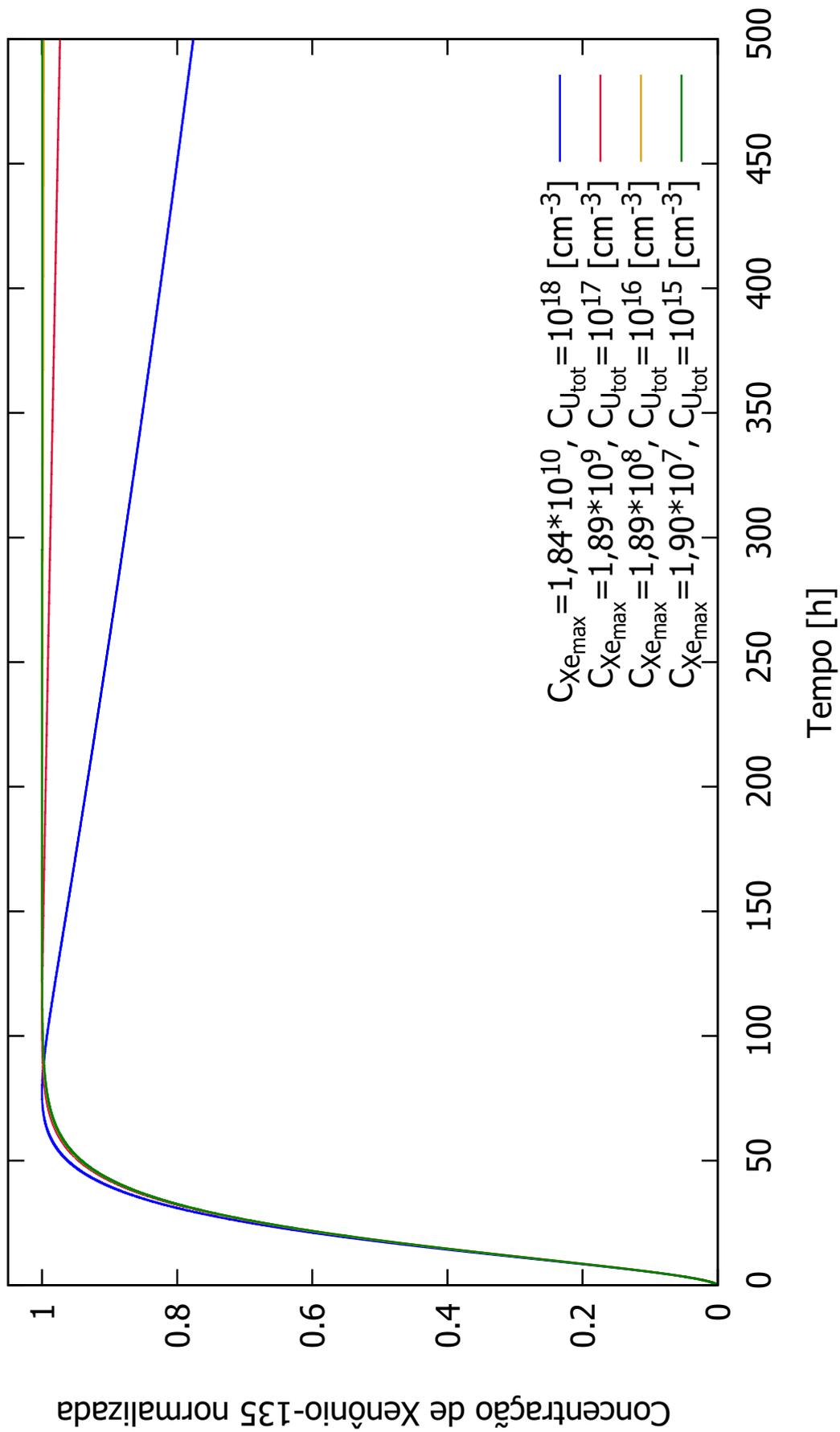


Figura 4.10 – Concentração de Xenônio-135 com $\rho_c = 0$.

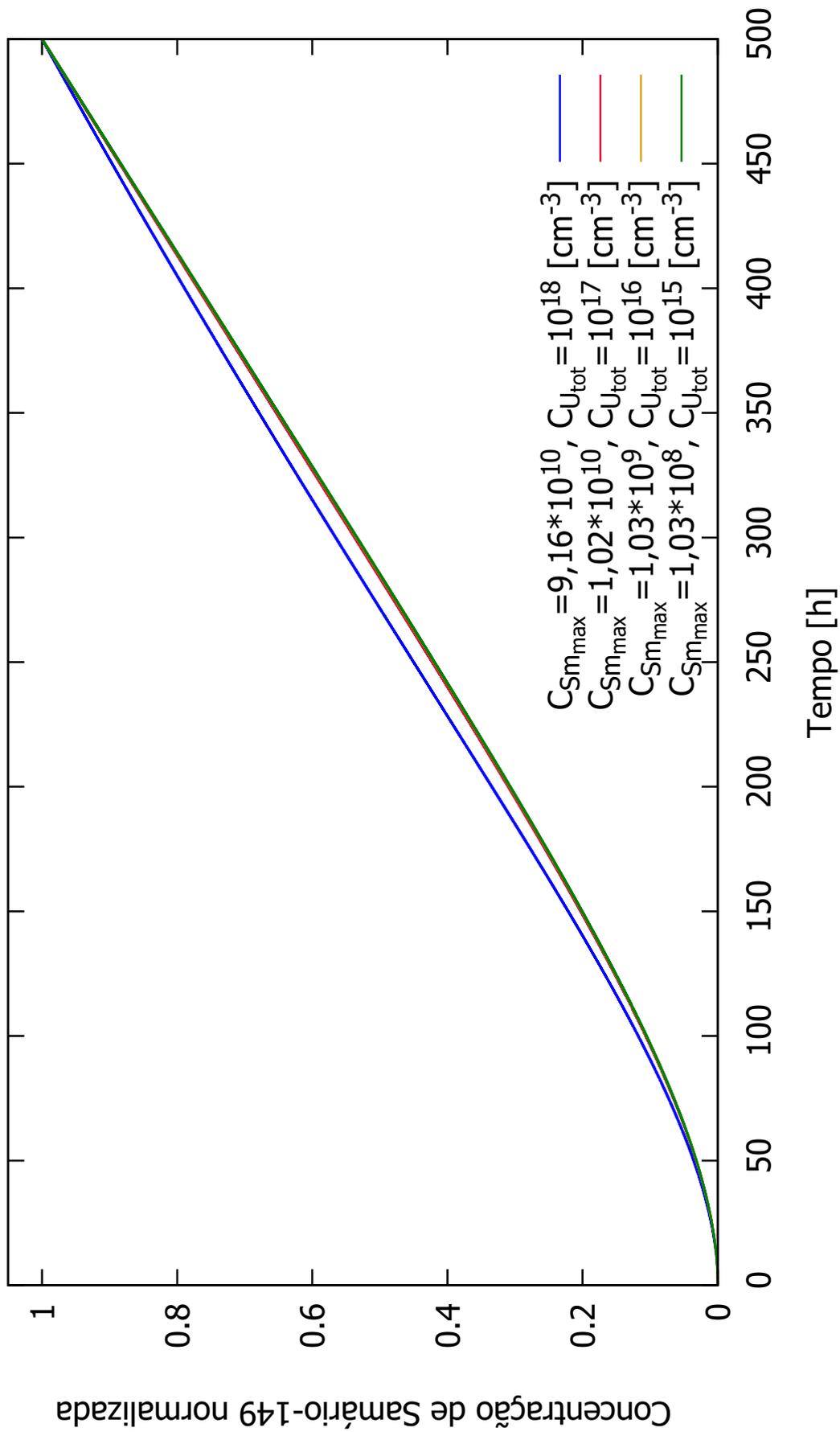


Figura 4.11 – Concentração de Samário-149 com $\rho_c = 0$.

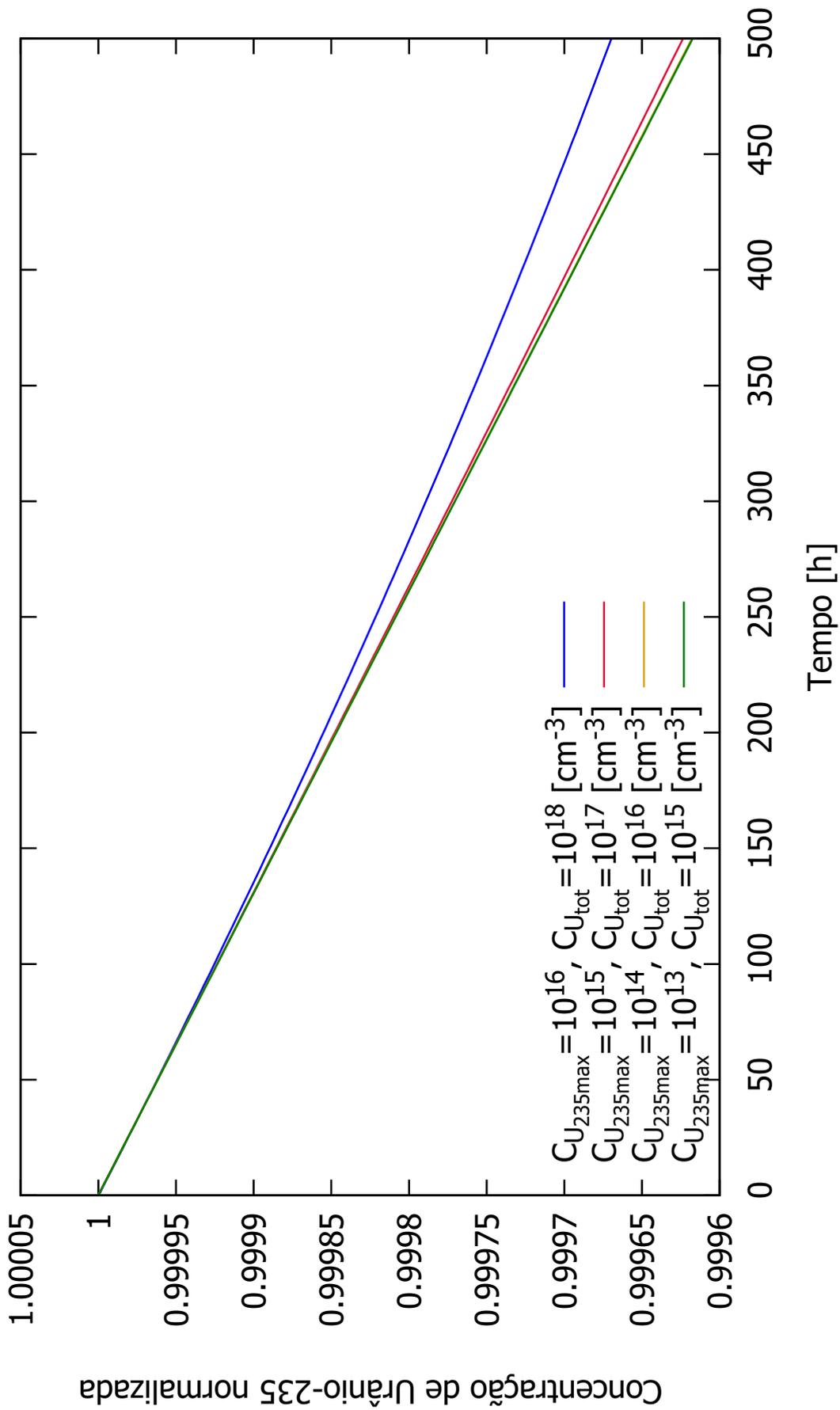


Figura 4.12 – Concentração de Urânio-235 com $\rho_c = 0$.

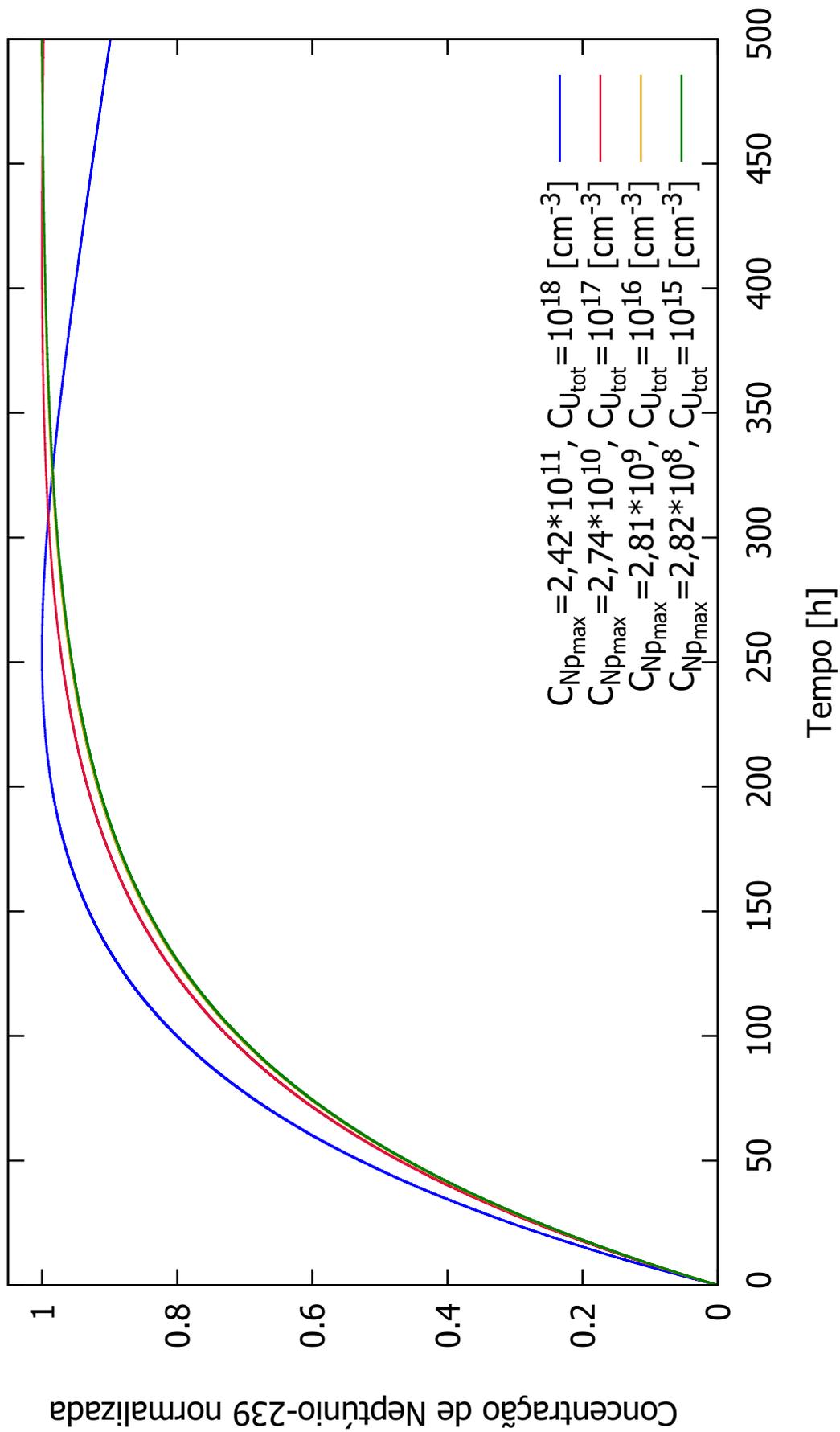


Figura 4.13 – Concentração de Neptúncio-239 com $\rho_c = 0$.

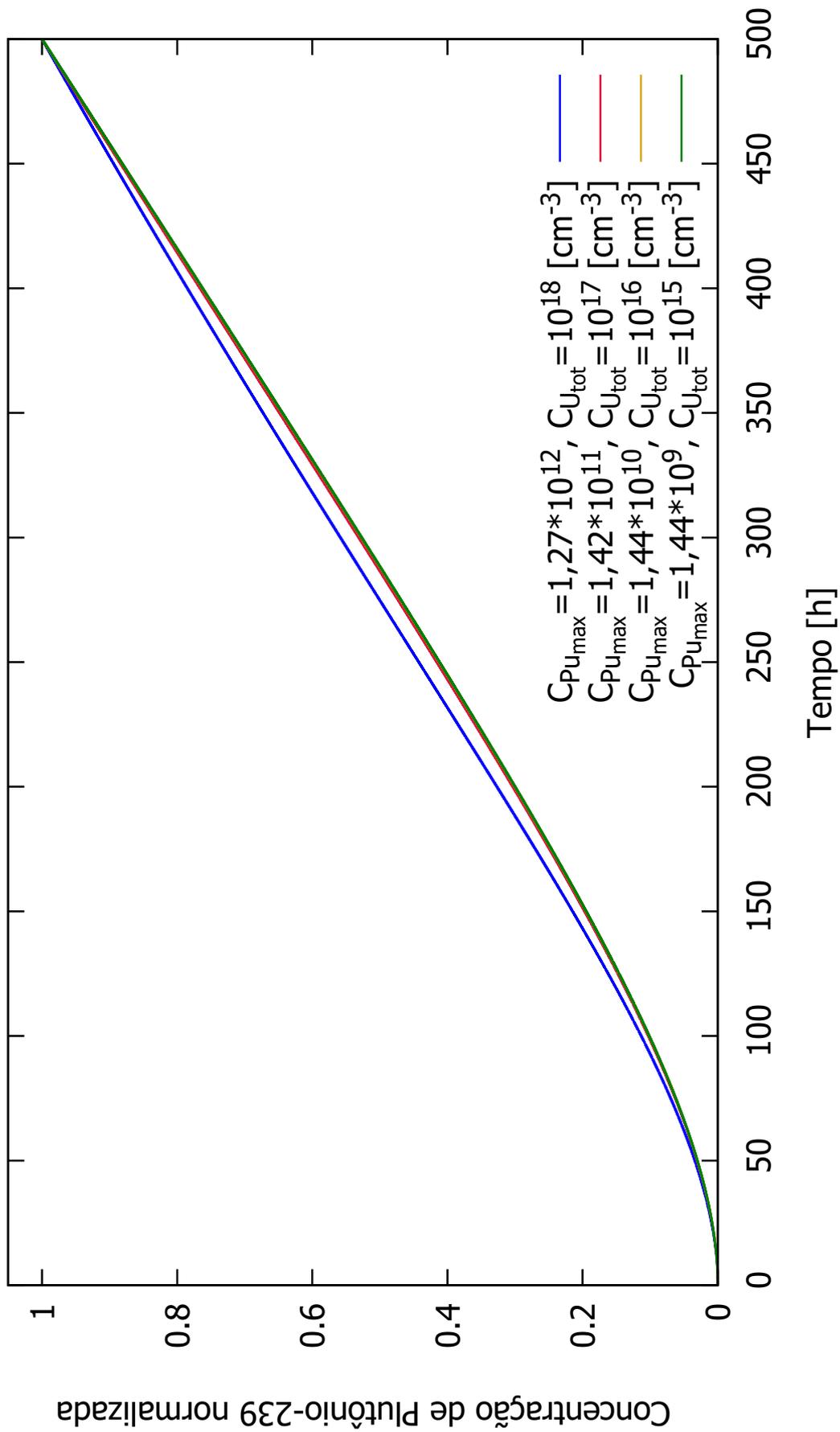


Figura 4.14 – Concentração de Plutônio-239 com $\rho_c = 0$.

Observa-se que com o aumento da concentração de urânio total, aumenta-se também a concentração dos subprodutos da fissão e captura, como esperado. O comportamento dos elementos I-135, Xe-135, Pm-149 e Np-239 segue um mesmo padrão, apresentando duas regiões específicas: a primeira região em que a geração é maior que a queima do elemento, aumentando rapidamente sua concentração, e a segunda consiste quando o elemento, após atingir seu pico, reduz lentamente sua concentração.

Em reatores mantidos perfeitamente em estado de criticalidade, é possível observar estes elementos estabilizando seu valor em uma constante [Duderstadt e Hamilton, 1976], contudo neste caso permite-se a alteração da reatividade em virtude do efeito da variação de concentrações dos elementos, desestabilizando o equilíbrio de geração e queima dos materiais, reduzindo-os na proporção em que a densidade de nêutrons também reduz. O efeito de transurânicos também está presente, contudo sua contribuição é significativamente inferior aos outros presentes nesta faixa de tempo. A redução na densidade de nêutrons resulta conseqüentemente em uma redução mais pronunciada na concentração dos venenos na segunda região.

O U-235, por sua vez, apresenta uma redução praticamente linear durante a operação do reator. O mesmo efeito contra intuitivo presenciado na reatividade aparece no U-235: aumentando sua concentração, diminui-se seu consumo, visto que, neste modelo, o Urânio-235 só está atrelado à reatividade a partir da sua queima e a geração de venenos e transurânicos. Já o Sm-149 e o Pu-239 apresentam crescimento da concentração durante todo o tempo simulado. Ao transcorrer do tempo, os núclídeos responsáveis pela geração de nêutrons vão reduzindo suas concentrações e contribuições, ao passo que a concentração do elemento estudado segue crescendo e aumentando sua queima. O balanço destes processos tende a resultar em um valor constante ao decorrer de um tempo suficientemente longo. Percebe-se também que as curvas com maiores concentrações de urânio total apresentam crescimento mais rápido destes elementos, se distanciando levemente das outras em uma escala intermediária de tempo. Este efeito ocorre em virtude dos elementos geradores atingirem mais rapidamente o seu pico de concentração em tempos menores.

Como a influência dos venenos e queima é evidentemente dominante nos gráficos apresentados, buscou-se fazer uma análise qualitativa dos efeitos separadamente, buscando poder avaliar de uma maneira mais precisa as ordens de grandeza das contribuições de

cada elemento na reatividade em longa escala de tempo. Para isso, escolheu-se a simulação em que estes efeitos foram mais pronunciados, ou seja, o caso de $C_{U_{tot}} = 10^{18}$, com 500 horas. Tal análise pode ser vista na Tabela 4.1, a partir da variação de suas seções de choque macroscópicas.

Tabela 4.1 – Variações das seções de choque macroscópicas de venenos e materiais físeis

Tempo [h]	$\bar{v}\delta\Sigma_c^{Xe}$	$\bar{v}\delta\Sigma_c^{Sm}$	$\bar{v}\delta\Sigma_f^{U_{235}}$	$\bar{v}\delta\Sigma_f^{Pu}$
1	0,0039568	$7,304955 \cdot 10^{-7}$	$1,476729 \cdot 10^{-4}$	$1,744895 \cdot 10^{-7}$
10	0,1346582	$7,024320 \cdot 10^{-5}$	$1,475998 \cdot 10^{-3}$	$1,682048 \cdot 10^{-5}$
50	0,5082502	$1,483790 \cdot 10^{-3}$	$7,321761 \cdot 10^{-3}$	$3,589108 \cdot 10^{-4}$
100	0,5243154	$4,879363 \cdot 10^{-3}$	$1,443107 \cdot 10^{-2}$	$1,192776 \cdot 10^{-3}$
250	0,4933241	$1,386856 \cdot 10^{-2}$	$2,797492 \cdot 10^{-2}$	$3,443556 \cdot 10^{-3}$
500	0,4099233	$4,148445 \cdot 10^{-2}$	$6,375099 \cdot 10^{-2}$	$1,053938 \cdot 10^{-2}$

A Tabela 4.1 apresenta a contribuição dos elementos na densidade de nêutrons a partir das variações das seções de choque macroscópicas em referência ao tempo t_0 . Utilizou-se esse critério de análise devido à proporcionalidade da influência das variações das seções de choque destes elementos na densidade de nêutrons.

Apesar da concentração de Pu-239 atingir valores consideravelmente maiores que a concentração dos venenos, sua seção de choque microscópica de fissão é muito menor que as seções de choque microscópicas de captura dos venenos. Essa diferença resulta nos venenos tendo um impacto consideravelmente maior no controle do reator do que os transurânicos. Percebe-se que o efeito dominante nesta faixa de operação é advindo dos venenos e da queima, principalmente do Xe-135, o que é esperado pois o combustível perde sua eficiência com o decorrer do tempo de utilização. Também se nota que no período um pouco inferior a um mês de operação, o Pu-239 já apresenta contribuições na mesma ordem de grandeza do Sm-149 e da queima do U-235, equivalendo a 23,85% e 16% das contribuições destes elementos, respectivamente. Também é importante comentar que apesar deste sistema parecer estável e comportado, em virtude da sua característica não-linear, pequenas alterações, como as contribuições positivas na reatividade geradas pelo Pu-239, podem resultar em mudanças consideráveis no comportamento do reator.

Um efeito semelhante ao aumento da concentração de urânio total no reator também pode ser observado quando se varia a densidade de nêutrons inicial dentro do reator para o mesmo combustível. A densidade de nêutrons e a concentração de precursores

inicial influenciam diretamente na amplitude dos efeitos estudados, tendo efeitos mais pronunciados quando se possui valores mais elevados. Observa-se este comportamento da densidade de nêutrons na Figura 4.15, onde variou-se sua concentração inicial entre 10^5 a $10^8[cm^{-3}]$, sendo apresentadas curvas já normalizadas.

Percebe-se que uma variação tanto na densidade de nêutrons como na concentração inicial de urânio influenciam não-linearmente as concentrações dos subprodutos do reator, e por consequência seus efeitos sobre a concentração de nêutrons. Tal comportamento já era previsto na modelagem, em virtude das contribuições não lineares dos venenos e transurânicos presentes na reatividade.

A modelagem atual apresenta uma ferramenta que permite analisar os efeitos não-lineares da variação constitucional do combustível na reatividade em cinética pontual, permitindo avaliá-la separadamente dos parâmetros de controle do reator. Contudo, pela complexidade matemática e numérica do problema, o estado atual de desenvolvimento do algoritmo ainda apresenta bastante instabilidade ao se calcular em valores de operação relatados para simular reatores nucleares, sendo necessário aperfeiçoar ainda os métodos de cálculo computacional para se obter maior estabilidade na faixa operacional desejada.

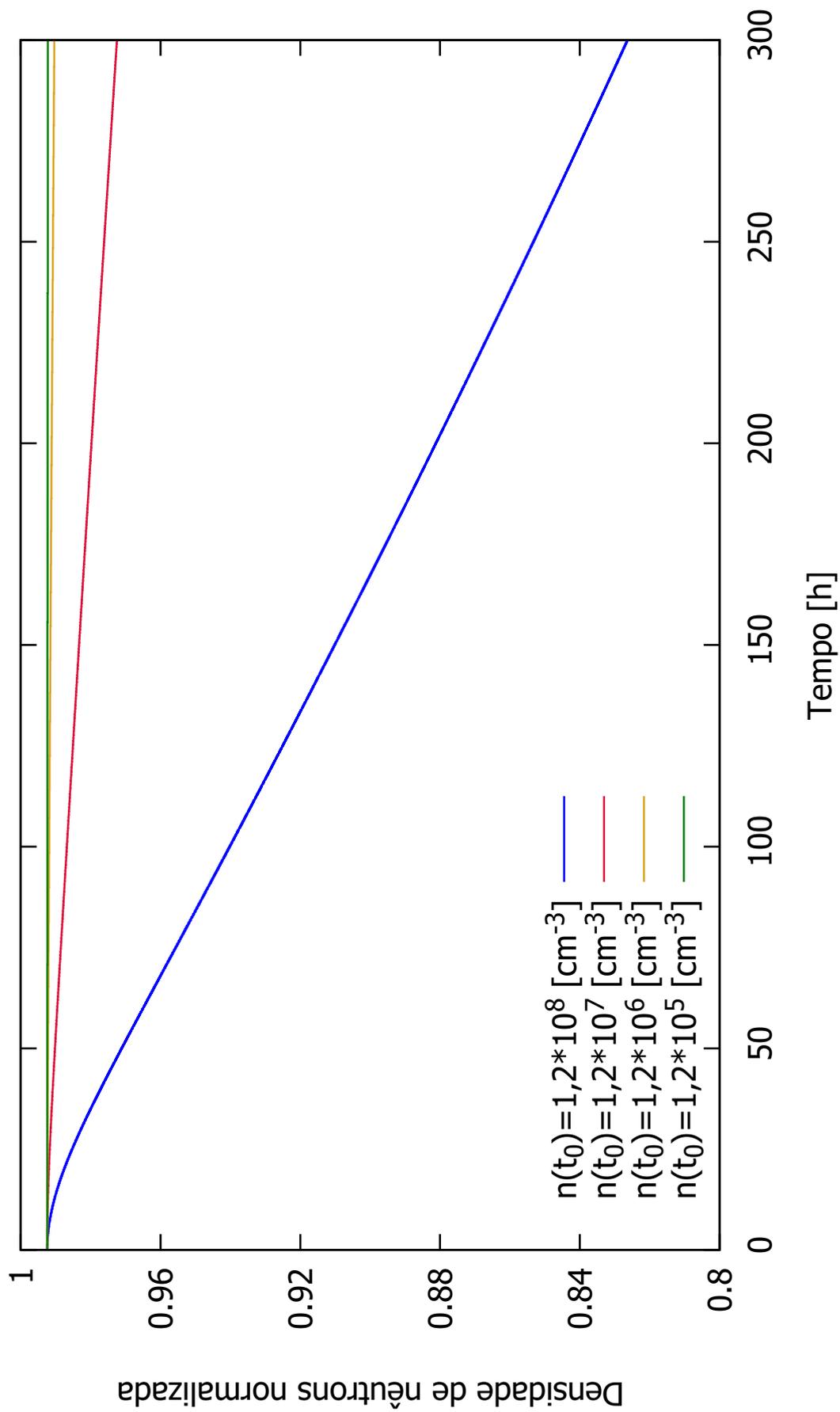


Figura 4.15 – Densidade de nêutrons variando as condições iniciais, com $\rho_e = 0$.

4.2 Combustível usado

É importante ressaltar que o modelo considera que o reator partiu de um ponto estacionário em t_0 , ou seja, ele já estava em operação até esse tempo tomado como referencial inicial, gerando venenos e transurânicos. Reatores com mais de um ciclo de combustível tem que lidar com a presença de elementos usados, apresentando venenos e transurânicos no combustível. Busca-se então analisar o comportamento do modelo e metodologia quando se considera um reator com elementos usados no combustível.

Simulou-se então o comportamento do reator para o caso A e o caso B (com $C_U = 10^{18}$) considerando elementos nas concentrações após $500h$ de operação em seu respectivo regime. Para o caso do reator desligando com elementos utilizados, não há uma variação significativa do comportamento, visto que a densidade de nêutrons e precursores acabam em poucas horas, resultando em um pico e em seguida redução dos elementos instáveis, como foi observado no caso com elementos novos. Os elementos estáveis por sua vez, como o Sm-149 e Pu-239, partem da concentração inicial presente e tendem a crescer até outro valor constante visto que eles são gerados sem qualquer mecanismo para reduzi-los, devido a inexistência de nêutrons no reator após algumas horas. Maiores detalhes podem ser observados nas figuras presentes no Apêndice A.

No caso em que o reator se mantém operando a partir de elementos usados, pode-se perceber, a partir das Figuras 4.16 à 4.22, que os elementos instáveis apresentam picos ainda mais elevados de concentração e uma queda ainda mais pronunciada na sua concentração do que no caso com elementos novos. Este efeito se deve ao fato de já haver uma concentração considerável de venenos antes e a queda mais acentuada da densidade de nêutrons, que sofre forte absorção pela grande concentração destes venenos. Os transurânicos também estão presentes mas representam apenas uma pequena parcela das contribuições influenciando na reatividade. Elementos estáveis, como o Sm-149 e Pu-239, e o U-235 apresentam comportamentos semelhantes aos observados no caso com combustíveis novos no reator.

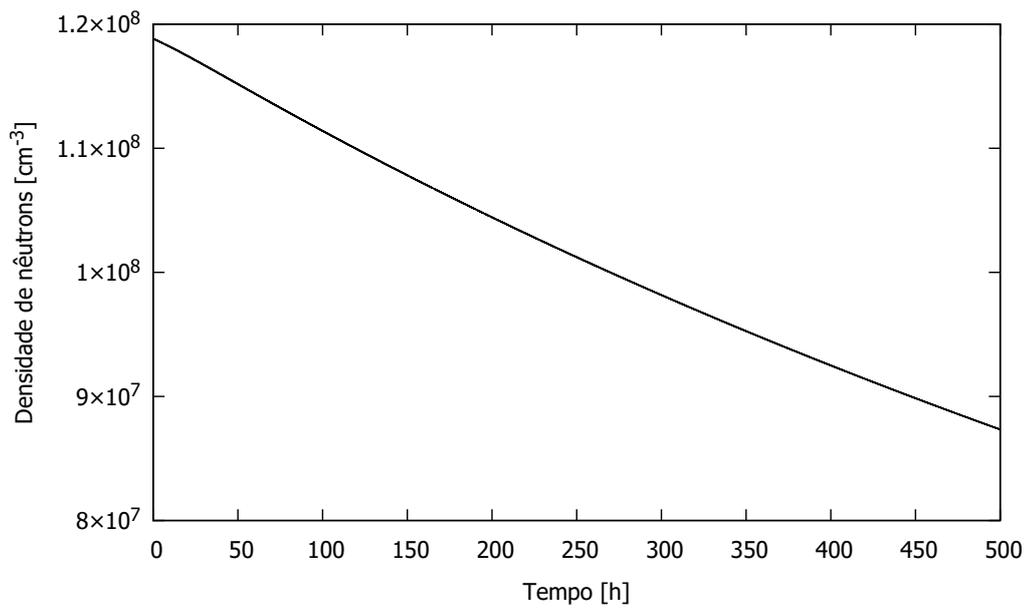


Figura 4.16 – Densidade de nêutrons com elementos usados e $\rho_c = 0$.

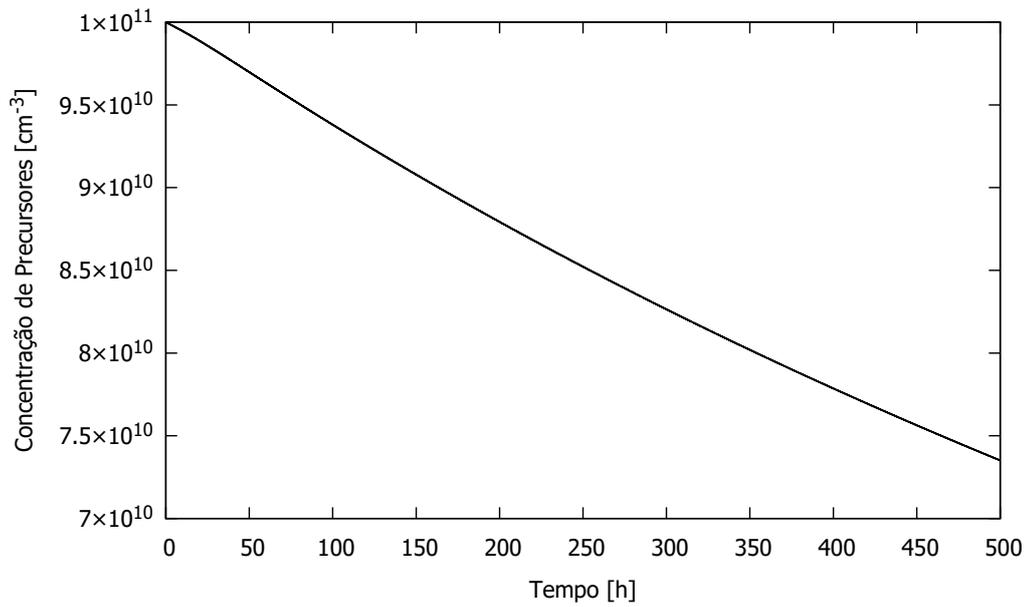


Figura 4.17 – Concentração de precursores com elementos usados e $\rho_c = 0$.

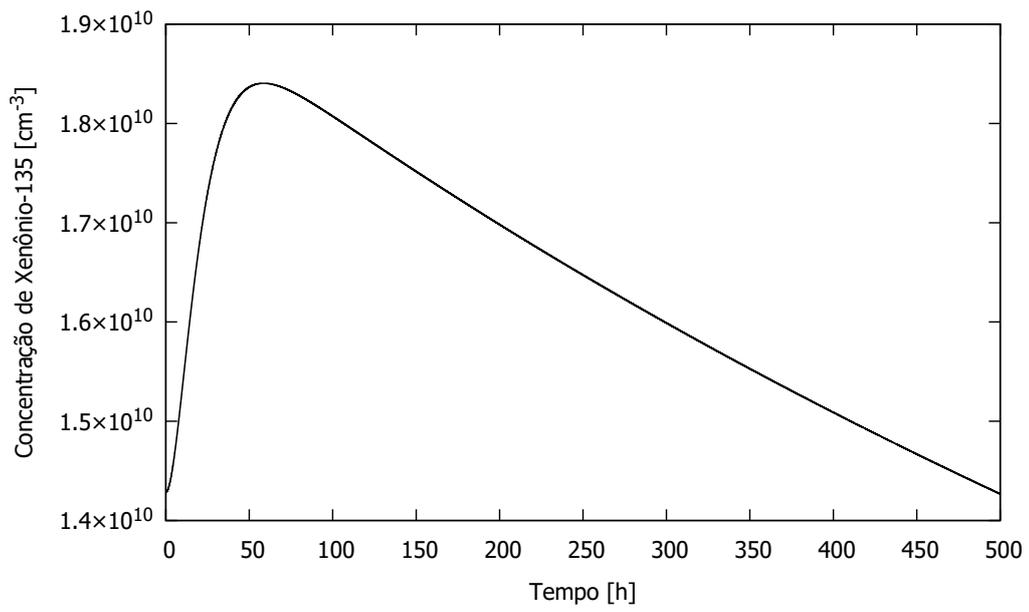


Figura 4.18 – Concentração de Xenônio-135 com elementos usados e $\rho_c = 0$.

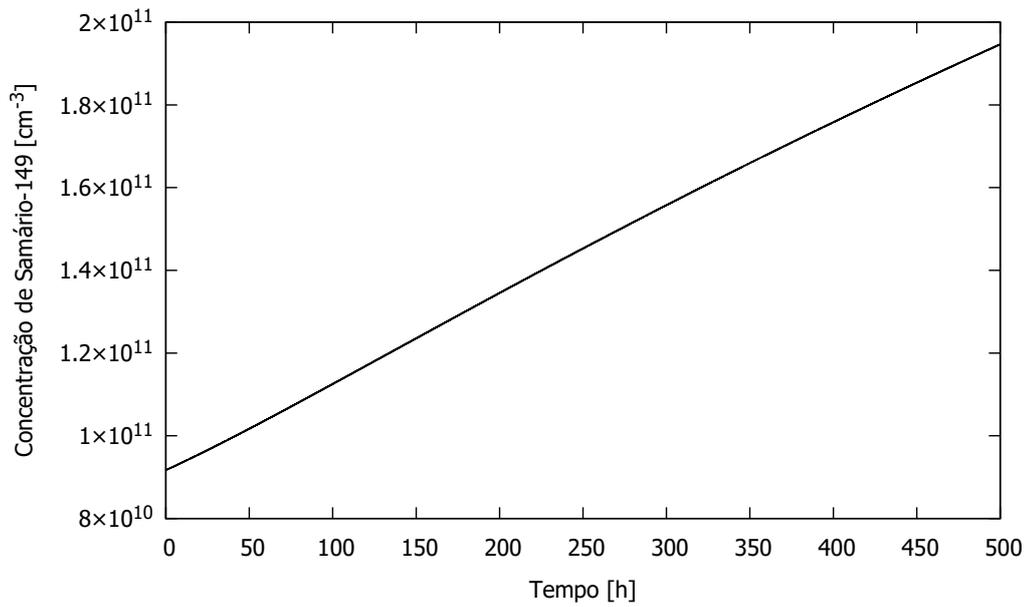


Figura 4.19 – Concentração de Samário-149 com elementos usados e $\rho_c = 0$.

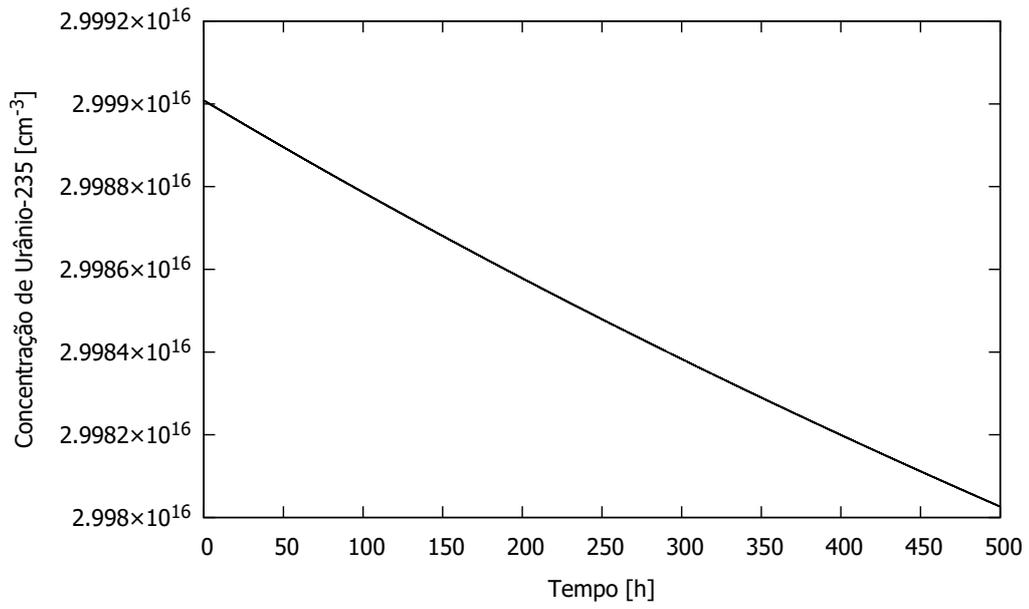


Figura 4.20 – Concentração de Urânio-235 com elementos usados e $\rho_c = 0$.

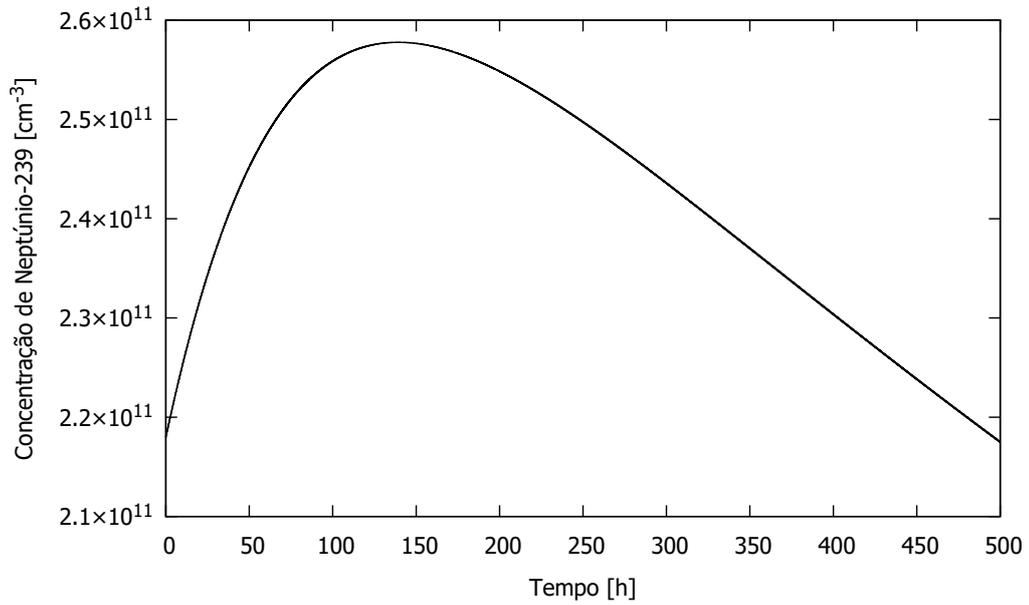


Figura 4.21 – Concentração de Neptúnio-239 com elementos usados e $\rho_c = 0$.

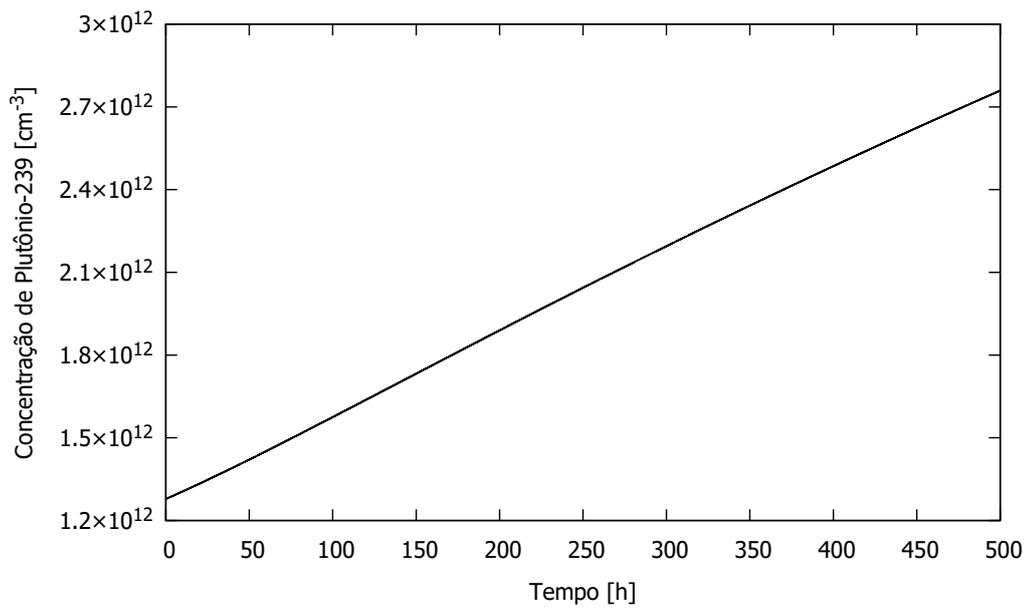


Figura 4.22 – Concentração de Plutônio-239 com elementos usados e $\rho_c = 0$.

Apesar de ser uma análise qualitativa e utilizar parâmetros bem abaixo dos usuais em simulações de reatores por cinética pontual, a metodologia aplicada apresenta consistência em descrever reatores com elementos novos ou usados, apresentando resultados coerentes e esperados da física do problema. Ressalta-se também que o modelo já considera condições iniciais não homogêneas pelo termo $(\delta\Sigma_x(t))$, visto que este considera a diferença da seção de choque macroscópica no instante t e o instante t_0 .

4.3 Análise do termo residual e estabilidade do código

Como comentado, o algoritmo desenvolvido apresentou instabilidade para certas faixas de concentrações iniciais dos elementos, apresentando-se um método, até então, instável para se descrever reatores em faixas usuais de operação. Tal instabilidade pode ser resultado de erros gerados pela metodologia utilizada, assim como de erros aritméticos gerados pelo cálculo computacional.

Apesar do método de decomposição de Adomian ser uma aproximação analítica, o truncamento da solução, assim como o método numérico envolvido para o cálculo das integrais e exponenciais, acarretam em erros. Analisou-se então o comportamento e consistência das soluções obtidas pela metodologia utilizada, assim como o termo residual destas na equação diferencial original.

Primeiramente avaliou-se a contribuição em valor absoluto das soluções de cada recursão obtidas pelo método, assim como a diferença entre soluções sucessivas, apresentadas nas Tabelas 4.2 e 4.3. A simulação escolhida para ser avaliada foi o caso B, com $C_{U_{tot}} = 10^{18}$, com 500 horas, visto que esta utiliza parâmetros mais próximos da região no domínio em que apresenta instabilidade.

Tabela 4.2 – Norma das diferenças entre soluções sucessivas

j	$ n_j - n_{j-1} $	$ C_j - C_{j-1} $	$ C_j^{Xe} - C_{j-1}^{Xe} $	$ C_j^{Sm} - C_{j-1}^{Sm} $	$ C_j^U - C_{j-1}^U $	$ C_j^{Np} - C_{j-1}^{Np} $	$ C_j^{Pu} - C_{j-1}^{Pu} $
1	119091764	100000908305	904281023,31	0,00000	30005742070280304	269543575820,16	0,00000
2	1858185,06	1520777453,87	18014388283,62	7723522253,03	5742619803154,74	269545245925,98	80818330456,37
3	16014101,68	13213683724,00	19783294417,90	413538966,60	35980757384,71	2708328478,41	2561504152,97
4	18600352,08	15333975267,83	519041227,73	681850960,89	364112265209,91	25654909323,67	4288563646,74
5	304934,55	260001300,24	2184095904,50	1507592155,75	416277823349,19	29496720864,69	12181863365,19
10	52295,35	41727958,52	35081096,49	452964950,95	4320195784,93	410358558,32	7363229466,38
20	123,62	92602,33	125261,734	298301,53	2394903,96	267921,45	68951477,90
30	0,44099	310,96	241,13	6,42048	2574,039	311,54	5511,27

Tabela 4.3 – Norma das soluções em cada recursão

j	$ n_j $	$ C_j $	$ C_j^{Xe} $	$ C_j^{Sm} $	$ C_j^U $	$ C_j^{Np} $	$ C_j^{Pu} $
0	119091764	100000908305	0,00000	0,00000	$3e + 16$	0,00000	0,00000
1	0,00000	0,00000	904281023,31	0,00000	5742070280303,01	269543575820,1	0,00000
2	1858185,06	1520777453,87	18918669306,93	7723522253,03	549522851,72	1670105,82	80818330456,37
3	17872286,75	14734461177,88	864625110,97	36530280236,44	2709998584,23	1670105,82	78256826303,40
4	728065,33	599514089,95	345583883,24	400642545446,36	400642545446,36	28364907907,90	73968262656,65
5	423130,77	339512789,71	2529679787,75	15635277902,82	15635277902,82	1131812956,78	61786399291,46
10	61639,49	48892690,32	2998235,34	3666603503,84	3666603503,84	347945639,83	27317197616,99
20	29,92	23131,07	71046,50	2178293,59	2178293,59	244532,90341	125598535,57
30	0,24172	171,24	160,18	5,98040	1601,82	192,96	8017,28

Pode-se observar que, apesar de uma flutuação inicial nas primeiras recursões, tanto nas contribuições das soluções quanto na diferença entre elas reduzem em valor absoluto com o aumento do número de recursões, apresentando um comportamento consistente no algoritmo, indicando que a série converge [Rudin, 1976].

Já o termo residual (\mathbf{r}) foi calculado a partir da equação diferencial original, Equação 3.27, sendo definido da seguinte forma:

$$\mathbf{r}^k = \left| \frac{d}{dt}(\mathbf{Y}^k(\mathbf{t})) - \mathbf{A}\mathbf{Y}^k(\mathbf{t}) - \mathbf{N}\mathbf{Y}^k(\mathbf{t}) \right|, \quad (4.2)$$

e

$$\mathbf{Y}^k(\mathbf{t}) = \sum_{j=0}^k \mathbf{Y}_j(\mathbf{t}), \quad (4.3)$$

onde o índice k corresponde ao erro residual presente na solução composta do somatório de soluções das k recursões do método de decomposição de Adomian. A derivada da solução $\mathbf{Y}^k(\mathbf{t})$ foi estimada pelo método de diferenças finitas da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{Y}^k(\mathbf{t}) = \frac{(\mathbf{Y}^k(\mathbf{t} + \Delta\mathbf{t}) - \mathbf{Y}^k(\mathbf{t} - \Delta\mathbf{t}))}{2\Delta t} + O(\Delta t^2), \quad (4.4)$$

sendo $O(\Delta t^2)$ o erro associado a essa aproximação na ordem de grandeza de (Δt^2) .

Na Figura 4.23 é apresentado o termo residual máximo obtido para o vetor $\mathbf{Y}(\mathbf{t})$ na simulação em função do número de recursões. Apesar deste se manter constante a partir de uma determinada recursão, ressalta-se que este resíduo é da ordem de grandeza de $10^{11}[cm^{-3}]$ ao passo que a ordem de grandeza do sistema é de $10^{13}[cm^{-3}]$, sendo consideravelmente inferior ao problema estudado e negligenciável. A origem deste resíduo pode ser justificada pelos erros oriundos do método numérico envolvido como também da falta de precisão do computador ao calcular casos em que há o problema de rigidez (*stiffness*).

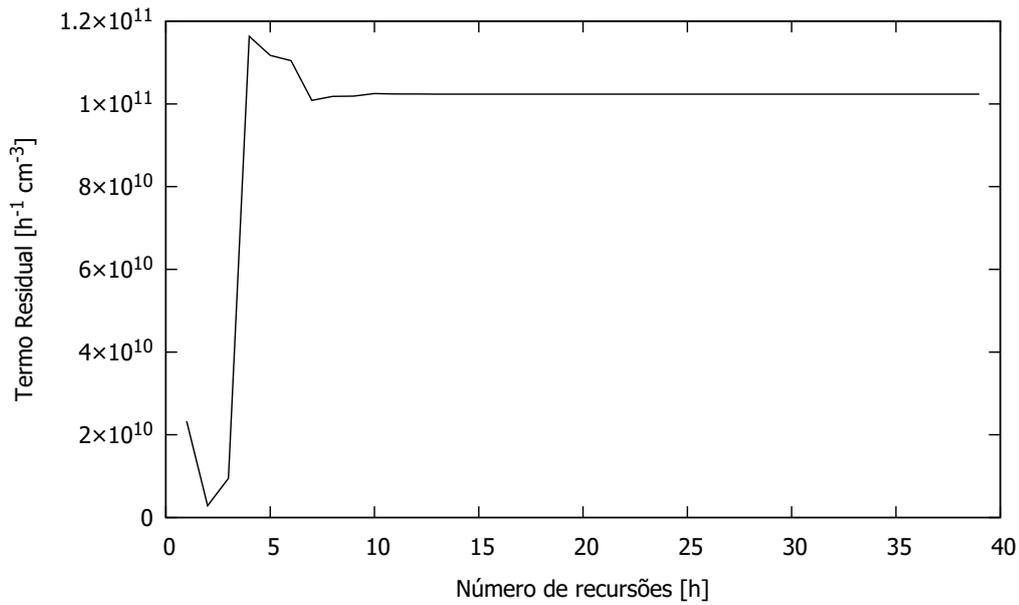


Figura 4.23 – Termo residual calculado em $t=100h$.

Apesar de auxiliar na estabilidade do código, a inserção de termos fictícios na parcela linear do problema resulta na necessidade de utilizar um maior número de recursões da decomposição de Adomian para simulações com tempos maiores. Quanto maior o tempo simulado, maior a quantidade de recursões necessárias para compensar o decaimento fictício adicionado inicialmente na parcela linear do problema (matriz \mathbf{A}). O Urânio-235, por sua vez, apresenta uma curva menos pronunciada por utilizar um decaimento fictício consideravelmente menor.

Uma análise do número de recursões necessárias para diferentes tempos de simulação é apresentada na Tabela 4.3. Considerando o caso B, optou-se pela concentração inicial de urânio total $C_{U_{tot}} = 10^{18} [cm^{-3}]$ e utilizou-se como critério de parada a variação da concentração em recursões sucessivas ($\epsilon_{parada} \leq 0,5\%$) em razão do somatório das soluções obtidas, calculado no tempo final da simulação. O elemento Pu-239 foi utilizado como parâmetro visto que apresenta a convergência mais lenta.

As soluções, obtidas a partir da simulação em valores que o algoritmo é estável, apresentam-se consistentes, indicando convergência da série e um termo residual pequeno em consideração à ordem de grandeza das equações utilizadas. Contudo pouca informação foi obtida quando o algoritmo se apresenta instável. A recorrência de problemas aritméticos em simulações de cinética pontual que apresentam alto grau de *stiffness* foi abordada de diversas formas, contudo aplicada apenas para modelos lineares. No estado atual de

Tabela 4.4 – Número de recursões utilizadas

Tempo total [h]	Número de recursões	ϵ_{parada}
10	7	$6,896 \cdot 10^{-4}$
50	9	$4,116 \cdot 10^{-3}$
100	11	$3,475 \cdot 10^{-3}$
200	17	$4,483 \cdot 10^{-3}$
300	22	$4,716 \cdot 10^{-3}$
500	35	$4,271 \cdot 10^{-3}$

desenvolvimento, o modelo ainda apresenta diversas limitações de estabilidade e aplicação, sendo necessários estudos futuros na análise de cálculo computacional para garantir esta estabilidade e convergência das soluções com parâmetros de operação desejados.

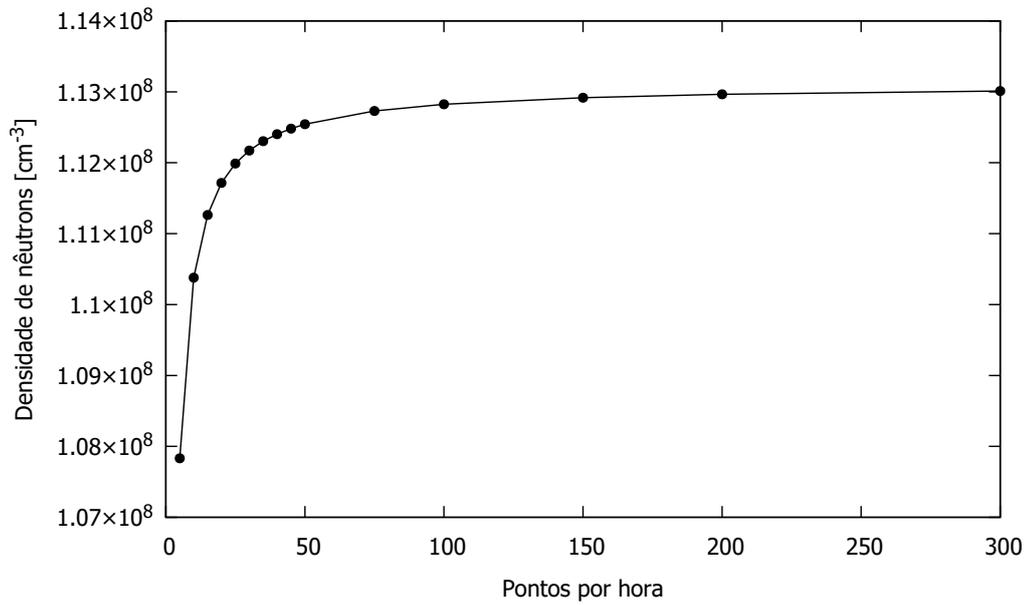
4.4 Teste de independência da resolução temporal

A utilização de métodos numéricos torna necessário avaliar também se a quantidade de pontos utilizados é suficiente para se simular o problema sem erros excessivos causados pela discretização da malha temporal ou espacial. Uma discretização esparsa pode causar erros na aproximação de integrais ou derivadas e acarretar em instabilidade ou inconsistência do código. Uma malha é considerada independente e consistente quando o refinamento da discretização (aumento do número de pontos) não acarreta mais em uma alteração significativa, segundo um critério de erro pré-definido, no resultado. Neste trabalho optou-se por uma malha temporal uniforme e regular.

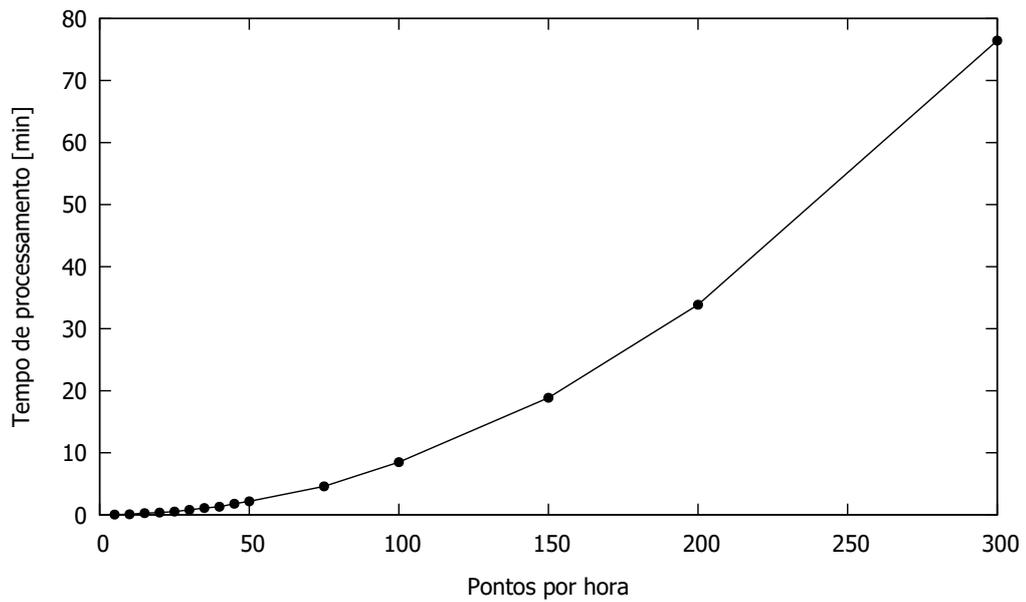
A importância de se avaliar a consistência da malha segue dois objetivos: minimizar erros do método e reduzir o tempo computacional. Em virtude do método executar diversas operações matriciais e integrações numéricas, o tempo computacional cresce significativamente com o número de pontos envolvidos, sendo de grande interesse obter um valor mínimo de pontos na malha temporal para que o erro seja consideravelmente baixo.

Portanto simulou-se o caso de um reator operando com reatividade de curta escala nula ($\rho_c = 0$) durante 100 horas, com trinta recursões, variando somente a quantidade de pontos, registrando a densidade de nêutrons e o tempo de processamento. A Figura 4.24 demonstra que a densidade de nêutrons tende a atingir um patamar e não alterar significativamente o valor a partir dos 200 pontos, contudo o tempo computacional apresenta um crescimento exponencial em função da quantidade de pontos, sendo então optado pela

utilização de uma malha temporal de 200 pontos por hora.



(a)



(b)

Figura 4.24 – Densidade de nêutrons (a) e tempo de processamento (b) em função do número de pontos por hora com $\rho_c = 0$, $C_U = 10^{18}[\text{cm}^{-3}]$ e $t = 100[\text{h}]$.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

No presente trabalho, estendeu-se o modelo de cinética pontual desenvolvido por Espinosa, 2016, em que se discretizam os efeitos da constituição do material do reator na reatividade dos demais parâmetros, incluindo efeitos de não apenas dos venenos produtos da fissão, como também os efeitos dos transurânicos e a queima do combustível ao longo do tempo. Tal modelo considera duas escalas de tempo no reator, a primeira de curto prazo ($10^1 s$) que representa os efeitos de operação do reator, e as de longo prazo ($10^5 s$) que corresponde à alteração da constituição do material presente dentro deste reator. A influência destes parâmetros de longo prazo gera uma não-linearidade nas equações, que foram resolvidas pela utilização do método de decomposição de Adomian, contudo apresentando problemas de rigidez (*stiffness*) ao se calcular em um mesmo sistema grandezas de diferentes ordens.

O algoritmo desenvolvido apresentou dificuldades em trabalhar com parâmetros operacionais usuais em simulações de reatores nucleares, em virtude de instabilidade aritmética. Estudos qualitativos e quantitativos foram realizados com condições de operações em que o algoritmo, no estado atual de desenvolvimento, apresenta estabilidade. Soluções em representação analítica foram obtidas para dois casos de reatividade controlada e constante, monoenergético, considerando apenas um grupo de precursores e utilizando elementos novos e usados dentro do reator.

A solução obtida no primeiro caso permite comparar com os resultados presentes na literatura [Espinosa, 2016]. Esta descreve o comportamento de um reator sendo desligado e a conseqüente geração de subprodutos ao longo do tempo em que este se encontra fora de operação. Os resultados obtidos assemelham-se com os valores encontrados por Espinosa, 2016 e apresentam-se condizentes com o esperado fisicamente. No segundo caso, buscou-se descrever um reator operando em longa escala de tempo, evidenciando a influência dos venenos, transurânicos e queima do combustível na reatividade. Foi realizado um estudo qualitativo variando os parâmetros iniciais em diversas faixas em que o algoritmo se apresentou estável.

Em parâmetros de operação em que o algoritmo se apresenta estável, as soluções do método de Adomian apresentam comportamento coerente e esperado do método, tendendo a reduzir sua contribuição com o decorrer das recursões, indicando convergência

da série. O termo residual apresenta-se invariante a partir de um número de recursões, contudo sua ordem de grandeza corresponde a aproximadamente 1% das equações originais. Pouca informação foi registrada sobre o comportamento das soluções quando se há instabilidade. Tal comportamento é atribuído à falta de precisão computacional ao descrever um sistema rígido, que em virtude do método, necessita calcular exponenciais de matrizes com problemas de rigidez e integrá-las, sendo uma possível fonte de erros aritméticos.

Resultados inesperados nas análises qualitativas foram obtidos no segundo caso, quando o aumento da concentração de Urânio-235 resulta na redução da reatividade, visto que o modelo utiliza a reatividade predeterminada e independente da concentração do combustível, contudo considera os efeitos da queima do combustível ao longo do tempo. A contribuição dos venenos apresentou-se dominante nas simulações realizadas na faixa de tempo estudada, sendo maiores que os efeitos de queima e transurânicos, contudo evidencia-se que, em um mês, os transurânicos já possuem influência na mesma ordem de grandeza da queima do combustível ou de alguns venenos, como o Samário-149. A contribuição de venenos como o Xenônio-135 tem maior influência em pequenas escalas de tempo, ao passo que a queima do Urânio-235, Samário-149 e Plutônio-239 tendem a aumentar sua contribuição nos efeitos do reator para grandes escalas de tempo. A não-linearidade das equações é evidenciada pelo comportamento não-linear do sistema quando se varia a densidade de nêutrons iniciais.

Apesar do método de Decomposição de Adomian permitir o cálculo direto para qualquer tempo sem a necessidade de se calcular os demais, o método numérico aplicado força o procedimento em calcular todos os instantes anteriores. Uma outra observação importante sobre o método consiste no número de recursões ser dependente do tempo total da simulação, em virtude da adição de termos fictícios na parcela linear seguida da sua subtração na parcela não-linear. Elementos usados também foram simulados e apresentaram comportamentos esperados para ambos os casos estudados. O modelo utilizado permitiu a definição de condições iniciais de maneira consistente para se utilizarem materiais fora da condição homogênea.

Este trabalho contribui no sentido de expandir uma metodologia que permite descrever reatores nucleares ao longo de todo seu ciclo de operação, considerando não só elementos que prejudicam o fluxo de nêutrons, como também elementos que contribuem

positivamente para a reatividade. Esta metodologia apresenta uma abordagem de se considerar cada vez menos a reatividade como um parâmetro a ser controlado e sim calculado por diferentes fenômenos separadamente. Apesar de haver simulações estáveis em certas faixas de operação e resultados coerentes com a física do problema e com o encontrado na literatura, o algoritmo apresenta dificuldades de se simular um reator em operação com parâmetros usualmente utilizados neste mesmo tipo de simulação, deixando como trabalho futuro um estudo mais elaborado no desenvolvimento computacional do problema, assim como sua otimização. Possíveis desdobramentos para este trabalho na área de engenharia seriam a consideração de toda a cadeia de venenos e transurânicos, assim como a abordagem com mais grupos de precursores de nêutrons e grupos de energia.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aboander, A. and Hamada, Y. Power series solution (PWS) of nuclear reactor dynamics with Newtonian temperature feedback, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 30, p. 1111–1122, 2002.

Aboander, A. and Nahla, A. **On padè approximations to the exponential function and application to the point kinetics equations**, 2004.

Adomian, G. A review of the decomposition method in applied mathematics, **Journal of mathematical Analysis and Applications**, vol. 135, p. 501–544, 1988.

Adomian, G. **Solving frontier problems of physics: The Decomposition Method**. Kluwer academic Publishers, USA, 1994.

Basken, J. and Lewins, J. D. Power series solutions of the reactor kinetics equations, **Nuclear science and engineering**, vol. 122, p. 407–416, 1996.

Biazar, J. and Shafiof, S. M. A Simple Algorithm for Calculating Adomian Polynomials, **Int. J. Contemp. Math. Sciences**, vol. 20, p. 975–982, 2007.

Boyce, W. E. and DiPrima, R. C. **Elementary Differential Equations and Boundary Value Problems**. John Wiley & Sons, USA, 2001.

Burguer, B. **Electricity production from solar and wind in Germany in 2017**. <https://www.energy-charts.de/downloads.htm>, 2018.

Ceolin, C. **Solução analítica da equação cinética de difusão multigrupo de nêutrons em geometria cartesiana unidimensional pela técnica da transformada integral**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2010.

Ceolin, C. **A equação unidimensional de difusão de nêutrons com modelo multigrupo de energia e meio heterogêneo : avaliação do fluxo para problemas estacionários e de cinética**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2014.

DOE. **Fundamentals Handbook, Nuclear Physics and Reactor Theory**. U.S. Department of Energy, Washington D.C 20585, USA, 1993.

Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J. **Nuclear Reactor Analysis**. John Wiley & Sons, USA, 1976.

Espinosa, C. E. **Modelagem e simulação dos venenos no combustível nuclear em cenários com duas escalas de tempo**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.

Ganopol, B. D. A highly accurate algorithm for the solution of the point kinetics equations, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 62, p. 564–571, 2013.

Hamada, Y. M. Confirmation of accuracy of generalized power series method for solution of point kinetics equations with feedback, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 55, p. 184–193, 2013.

Hetrick, D. **Dynamics of Nuclear Reactors**. University of Chicago Press, Chicago, USA, 1th edition, 1971.

Li, H., Shang, X., and Chen, W. An accurate solution of point kinetics equations of one-group delayed neutrons and an extraneous neutron source for step reactivity insertion, **Chinese Science Bulletin**, vol. 55, p. 4116–4119, 2010.

Michel-Sendis, F. **Nuclear Data Services**. <https://www.oecd-nea.org/dbdata/>, 2018.

Moler, C. and Loan, C. V. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later, **Society for Industrial and Applied Mathematics**, vol. 45, p. 3–000, 2003.

Murray, R. **Nuclear Energy: An Introduction to the Concepts, Systems, and Applications of Nuclear Processes**. Butterworth-Heinemann, USA, 2008.

Nahla, A. A. An efficient technique for the point reactor kinetics equations with Newtonian temperature feedback effects, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 38, p. 2810–2817, 2011.

Nichols, A. L., Aldama, D. L., and Verpelli, M. **Handbook of nuclear data for safeguards: database extensions**. <https://www-nds.iaea.org/sgnucdat/safeg2008.pdf>, 2008.

Oliveira, F. R. **Solução da Equação de Cinética de Difusão de Nêutrons em Geometria Cilíndrica Tridimensional**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2017.

Petersen, C. Z. **Solução analítica das equações de cinética pontual espacial da teoria de difusão de nêutrons pelas técnicas de GITT e Decomposição**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.

Petersen, C. Z., Dulla, S., Vilhena, M. T. M., and Ravetto, P. An analytical solution of the point kinetics equations with time-variable reactivity by the decomposition method, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 53, p. 1–4, 2011.

Reuss, P. **Neutron Physics**. EDP Sciences, France, 2008.

Rudin, W. **Principles of Mathematical Analysis**. McGraw-Hill Higher Education, USA, 3th edition, 1976.

Rydin, R. A. **Nuclear Reactor Theory and Design**. PBS Series in Reactor Physics, USA, 3th edition, 2003.

Schramm, M. **An algorithm for multi-group two-dimensional neutron diffusion kinetics in nuclear reactor cores**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.

Sekimoto, H. **Nuclear Reactor Theory**. COE-INES, Japan, 2007.

Seliverstov, V. and Shvedov, O. Integral point-kinetics equation for calculating the fast kinetics of a subcritical system with pulsed external source, **Atomic Energy**, vol. 85, p. 523–531, 1998.

Silva, M. W. **Representação analítica da solução da equação de cinética pontual para a reatividade variável no tempo livre de rigidez**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2013.

Silva, M. W. **Uma representação analítica não rígida para a solução das equações de cinética pontual de nêutrons considerando retroalimentação de temperatura e uma extensão estocástica**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2017.

Weymar, G. J. **Uma solução da equação multidimensional de advecção-difusão para a simulação da dispersão de contaminantes reativos na camada limite atmosférica**. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.

APÊNDICE A – Resultados complementares de cinética pontual

No Apêndice A apresentam-se os resultados obtidos para as concentrações de Iodo-135 e Promécio-149 para os casos estudados, assim como os resultados obtidos para todos os elementos no Caso A com combustível usado.

A.1 Combustível novo

A.1.1 Caso A

Os resultados obtidos para o Iodo-135 e o Promécio-149 no caso em que o reator se encontra com combustível novo e reatividade de curta escala $\rho_c(t) = -0,0001$ são apresentados nas figuras a seguir:

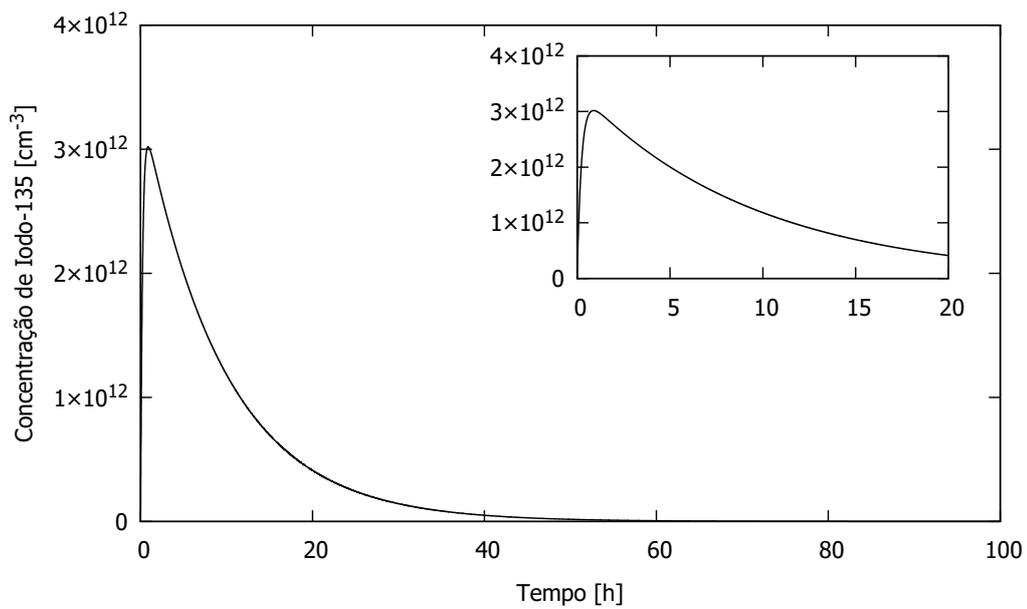


Figura A.1 – Concentração de Iodo-135 com combustível novo e $\rho_c = -0,0001$.

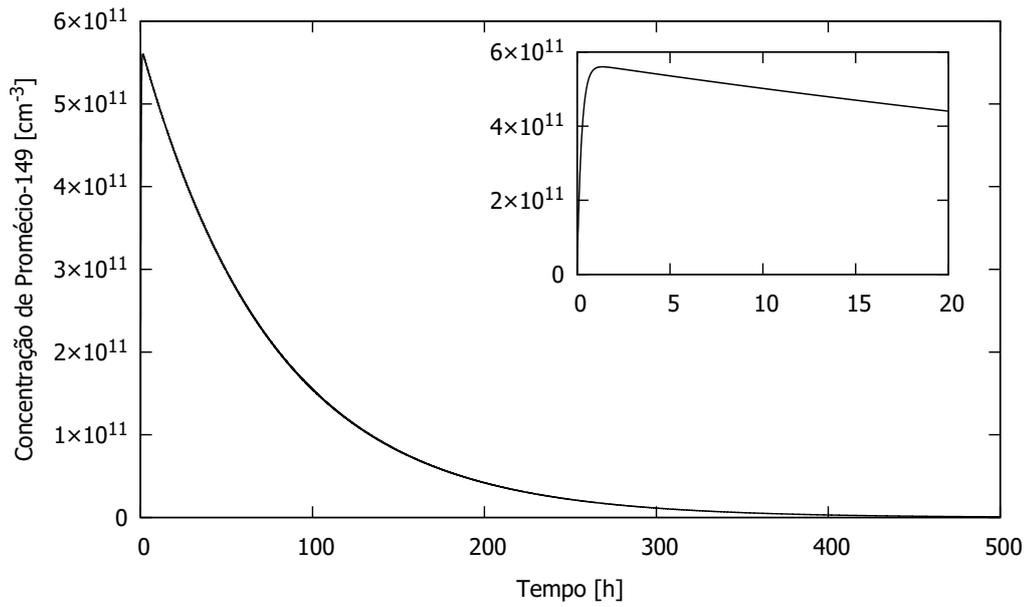


Figura A.2 – Concentração de Promécio-149 com combustível novo e $\rho_c = -0,0001$.

A.1.2 Caso B

Os resultados obtidos para o Iodo-135 e o Promécio-149 no caso em que o reator se encontra com combustível novo e reatividade de curta escala $\rho_c(t) = 0$ são apresentados nas figuras a seguir:

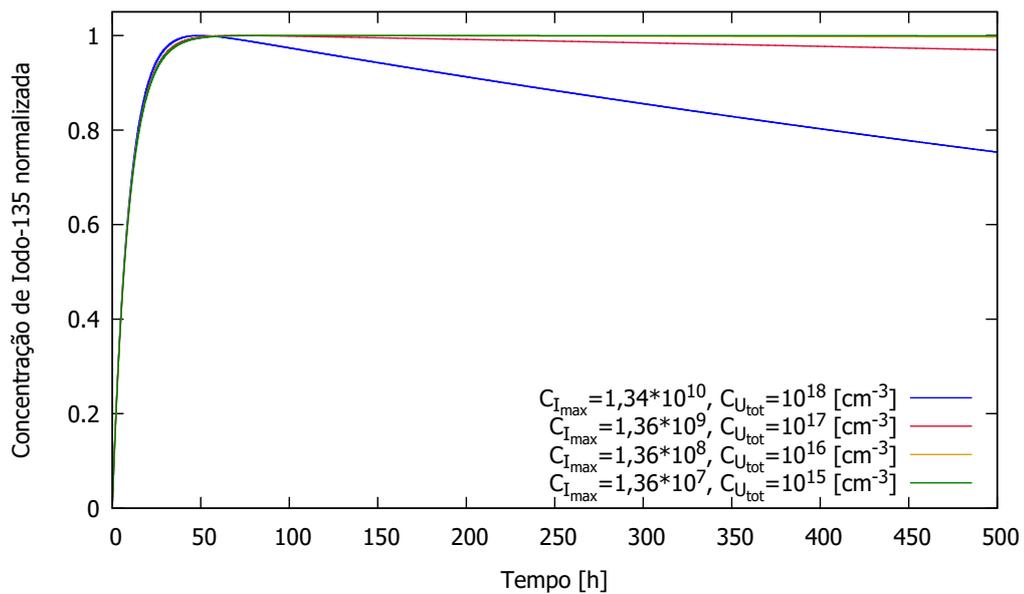


Figura A.3 – Concentração de Iodo-135 com combustível novo e $\rho_c = 0$.

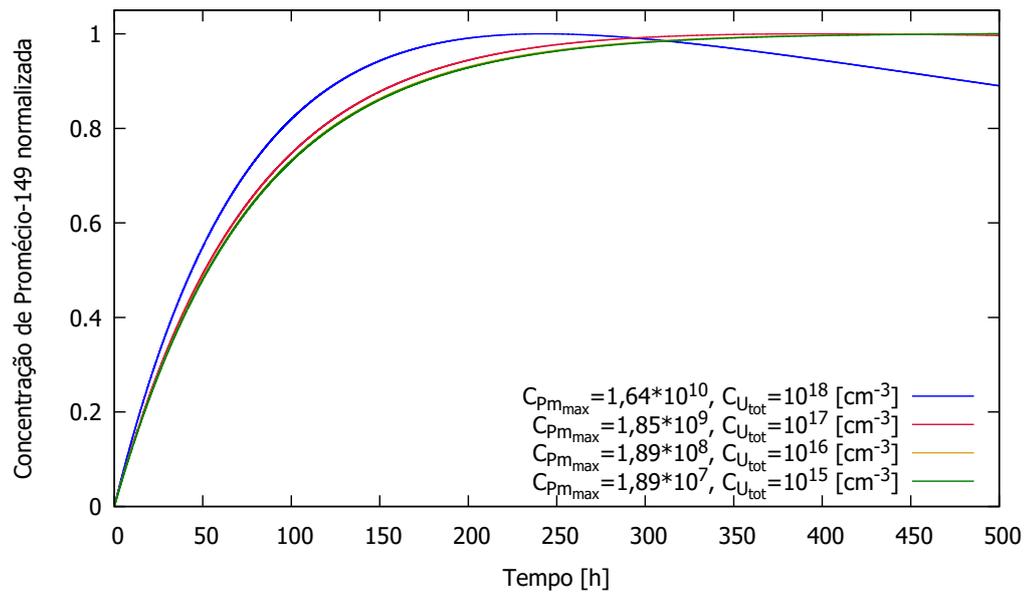


Figura A.4 – Concentração de Promécio-149 com combustível novo e $\rho_c = 0$.

A.2 Combustível usado

A.2.1 Caso A

Os resultados obtidos para os elementos no Caso A, em que o reator esteja operando com $\rho_c(t) = -0,0001$ com elementos usados por 500 horas no mesmo regime, são apresentados nas figuras a seguir:

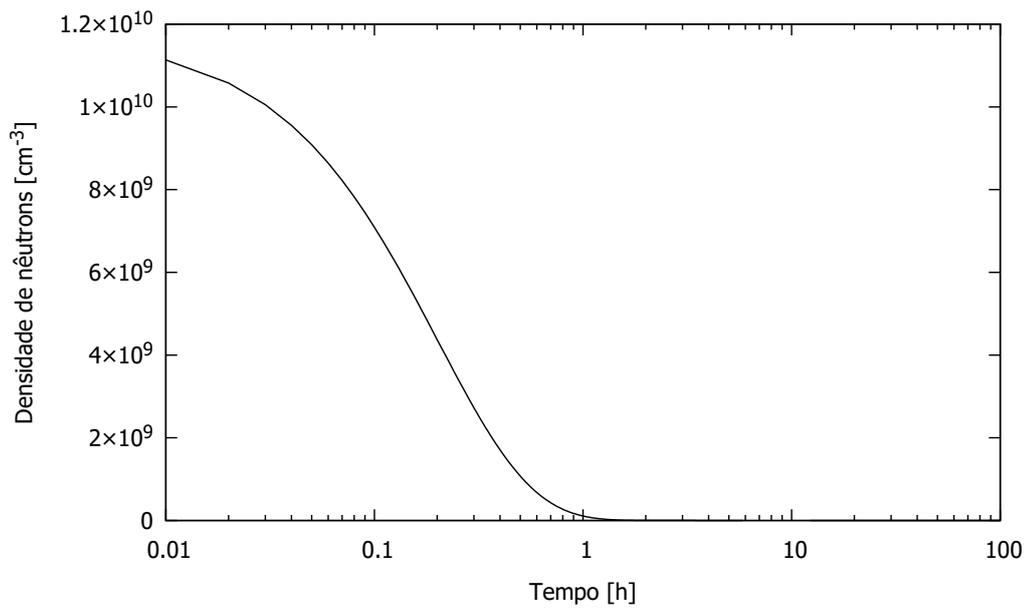


Figura A.5 – Densidade de nêutrons com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

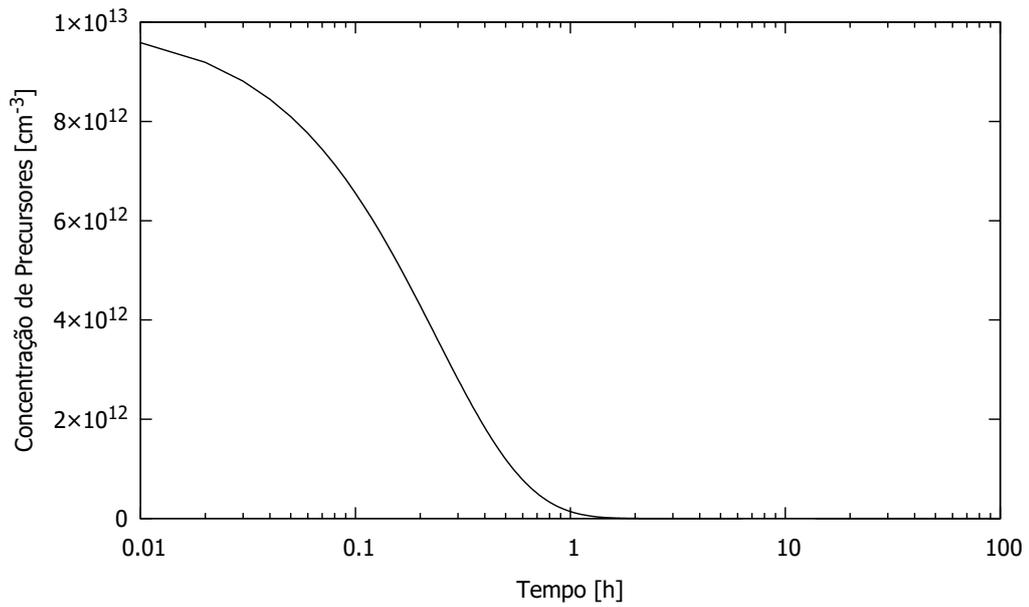


Figura A.6 – Concentração de precursores com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

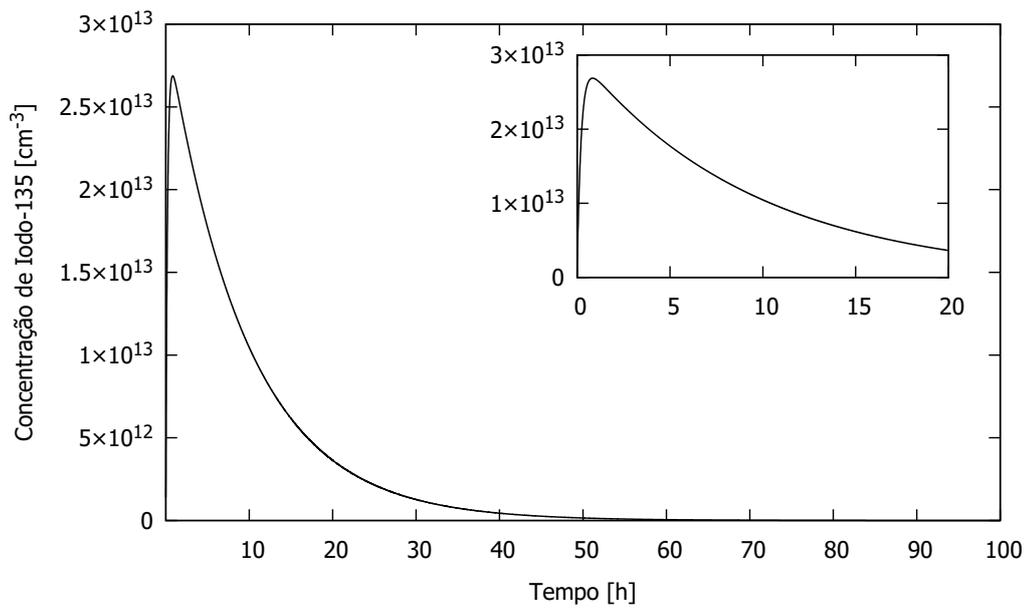


Figura A.7 – Concentração de Iodo-135 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

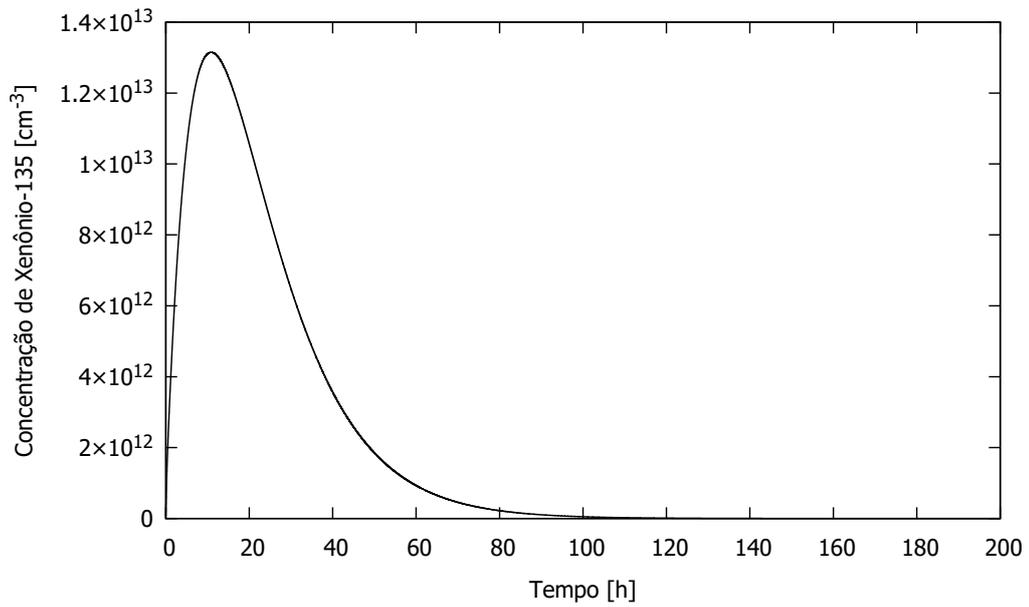


Figura A.8 – Concentração de Xenônio-135 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

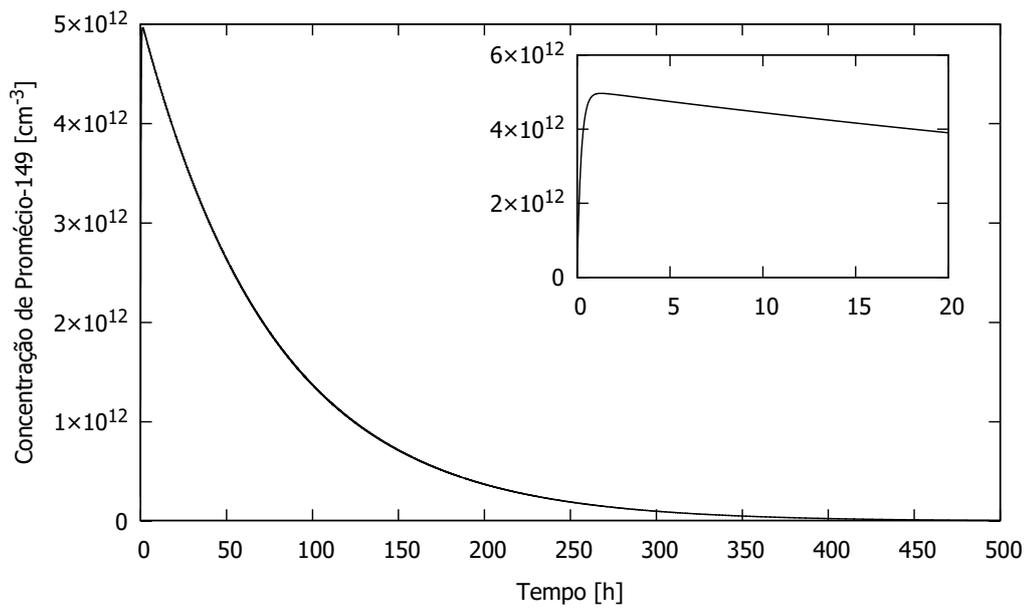


Figura A.9 – Concentração de Promécio-149 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

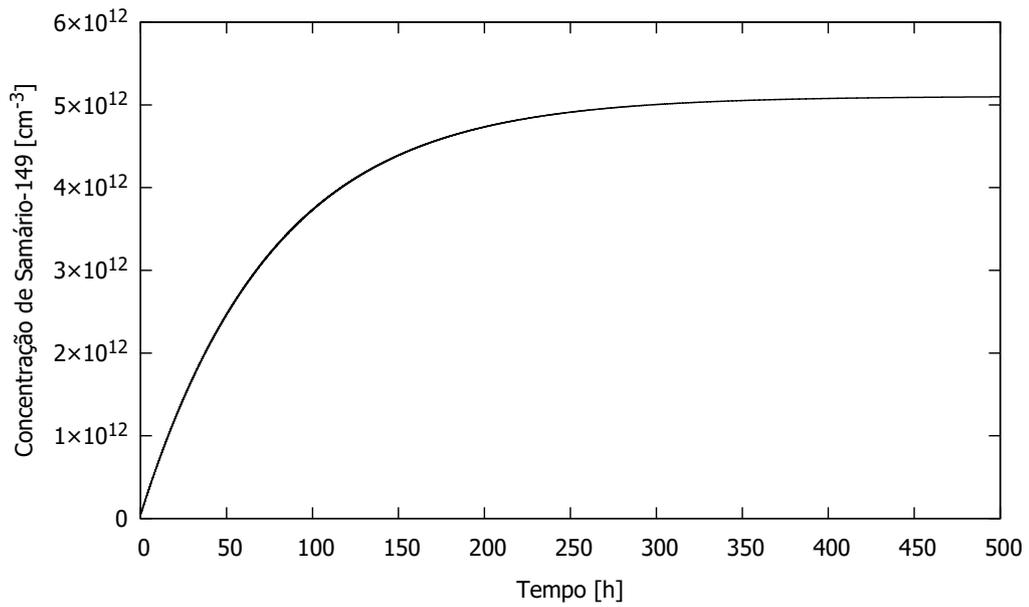


Figura A.10 – Concentração de Samário-149 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

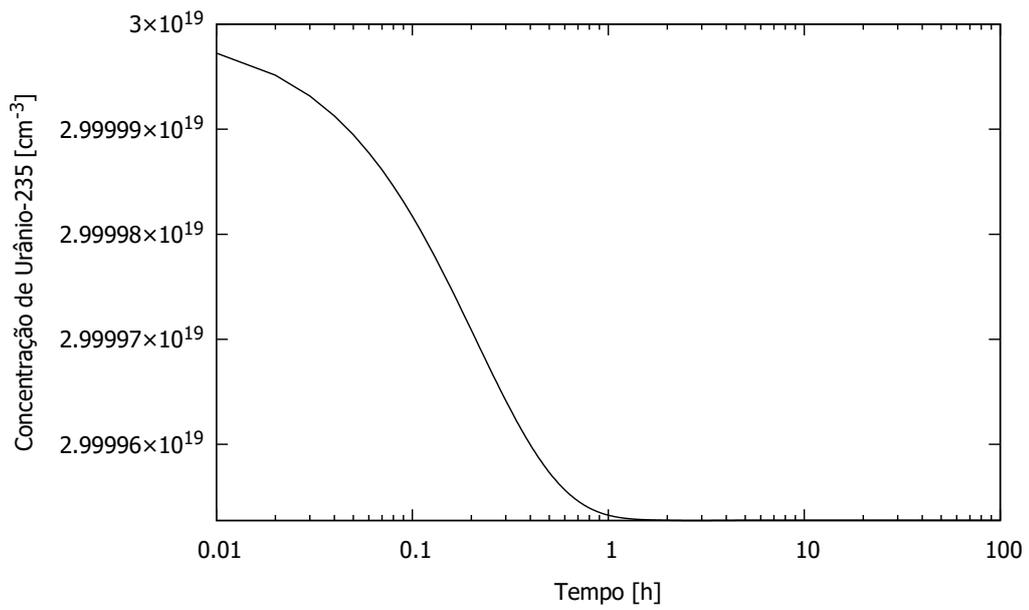


Figura A.11 – Concentração de Urânio-235 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

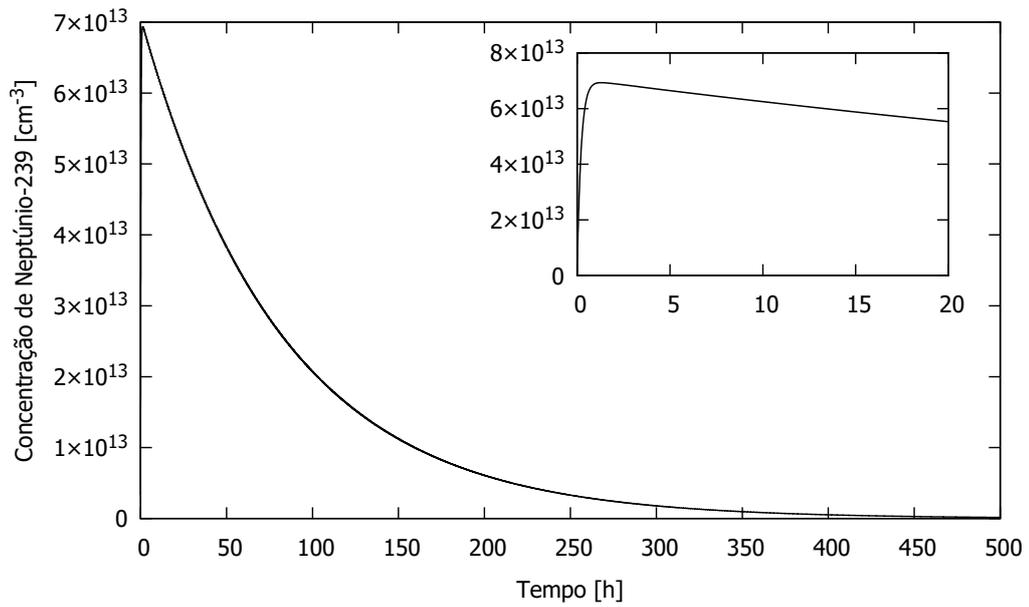


Figura A.12 – Concentração de Neptúnio-239 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

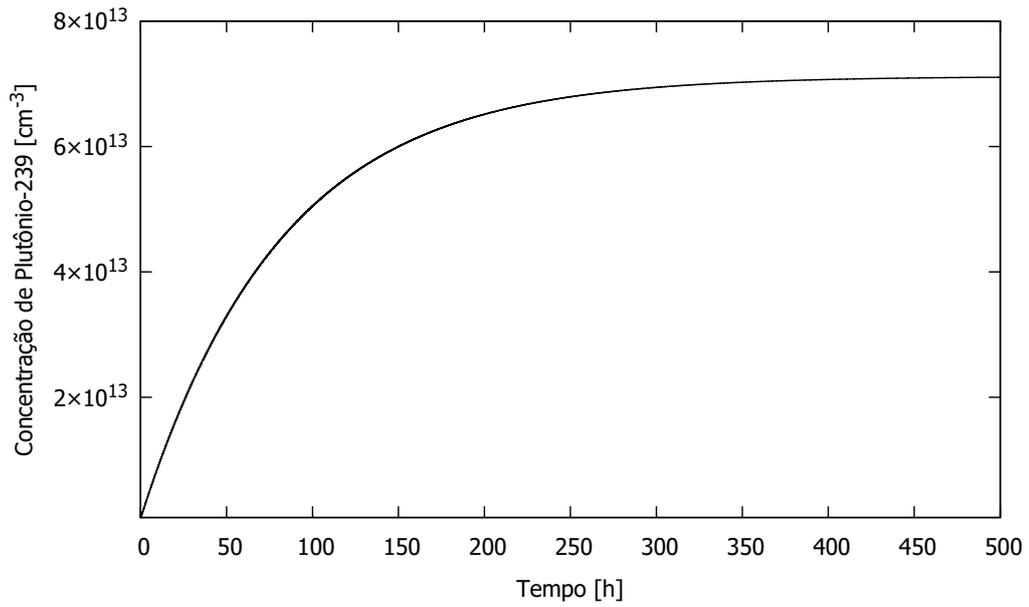


Figura A.13 – Concentração de Plutônio-239 com elementos usados e $\rho_c = -0,0001$.

A.2.2 Caso B

Os resultados obtidos para o Iodo-135 e Promécio-149 para o Caso B, em que o reator esteja operando com $\rho_c(t) = 0$ com elementos usados por 500 horas no mesmo regime, são apresentados nas figuras a seguir:

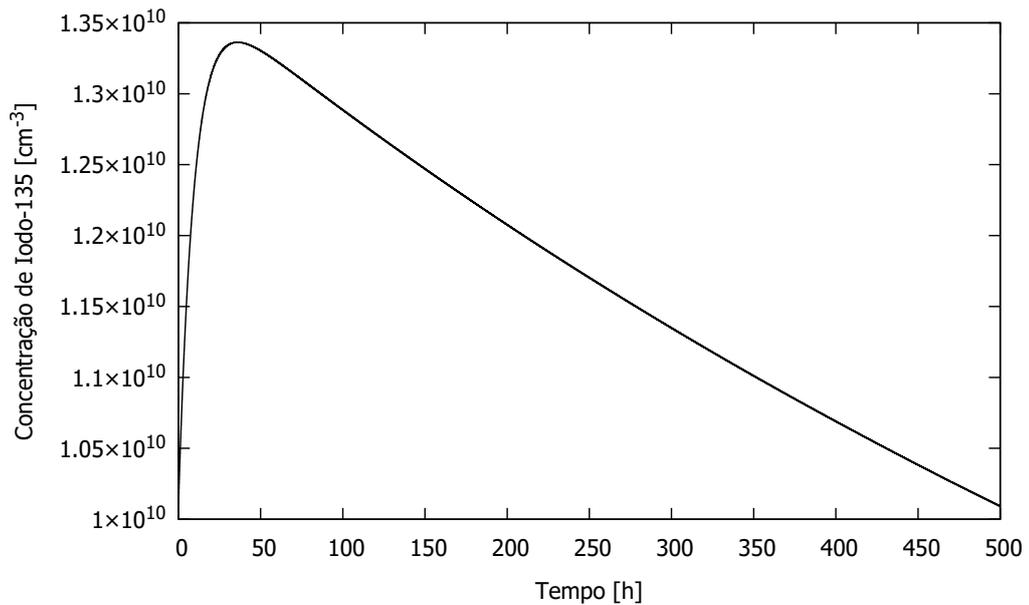


Figura A.14 – Concentração de Iodo-135 com elementos usados e $\rho_c = 0$.

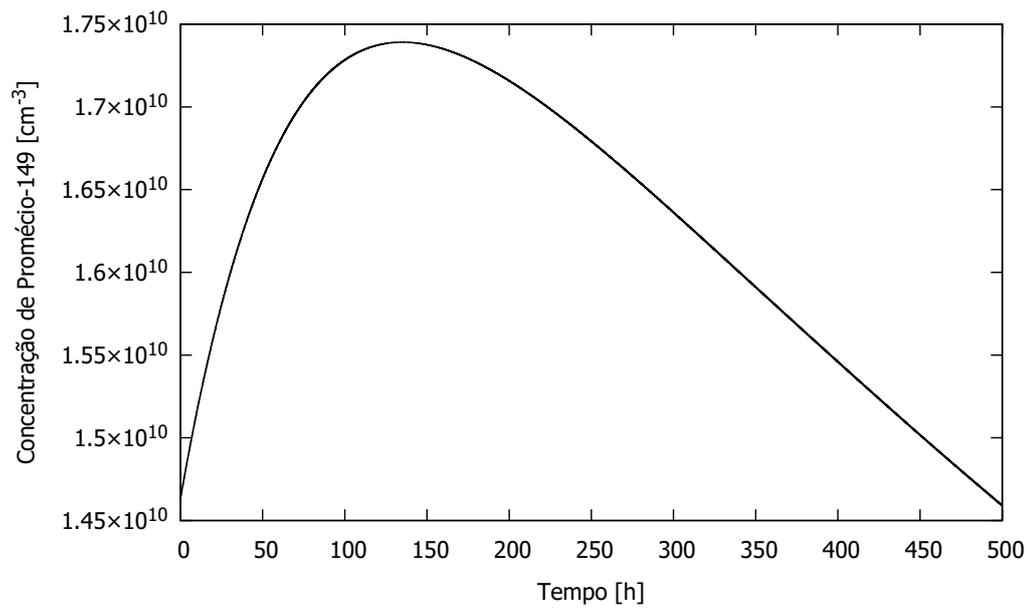


Figura A.15 – Concentração de Promécio-149 com elementos usados e $\rho_c = 0$.

ANEXO I – Dedução da equação de cinética pontual a partir da equação de difusão de nêutrons

No Anexo I apresenta-se a dedução da equação de cinética pontual para a densidade de nêutrons a partir das equações de difusão de nêutrons apresentada por Espinosa, 2016. A mesma metodologia de dedução também pode ser utilizada para se obter a equação de cinética pontual para a concentração de precursores de nêutrons.

Considerando que o sistema operou de $t = 0$ até $t = t_0$ no estado estacionário, então o fluxo de nêutrons em $t = t_0$ é dado pela seguinte equação:

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t_0))\nabla\phi(\mathbf{r}, E, t_0) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0)\phi(\mathbf{r}, E, t_0) \\ & = \int_0^\infty \chi(E)\nu(E')\Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0)\phi(\mathbf{r}, E', t_0)dE' \end{aligned} \quad (\text{I.1})$$

onde

$$D(\mathbf{r}, E, t_0) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t_0)}, \quad (\text{I.2})$$

$$\Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) = \Sigma_c(\mathbf{r}, E, t_0) + \Sigma_f(\mathbf{r}, E, t_0) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E, t_0) \quad (\text{I.3})$$

e

$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E, t_0) = \sum_{i=1}^I C_i(\mathbf{r}, t_0)\sigma_x^i(E), \quad (\text{I.4})$$

sendo $C_i(\mathbf{r}, t_0)$ a concentração isotópica (em $\text{barn}^{-1}\text{cm}^{-1}$) do nuclídeo i no instante t_0 , $\sigma_x^i(E)$ é a seção de choque microscópica do nuclídeo i (em barn) para a reação do tipo x (captura - c, fissão - f, espalhamento - s e transporte - tr) e a Σ_x é a seção de choque macroscópica para a reação do tipo x (captura - c, fissão - f, espalhamento - s e transporte - tr).

Se a partir de $t = t_0$ ocorre um efeito transiente no sistema, então, o fluxo de nêutrons passa a ser governado pelas seguintes equações (considerando apenas um grupo de precursores de nêutrons atrasados):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\nu(E)}\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r}, E, t) - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t))\nabla\phi(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t)\phi(\mathbf{r}, E, t) \\ & = \int_0^\infty \left(\chi(E)\nu(E')\Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \right) \phi(\mathbf{r}, E', t)dE' \\ & + \lambda C(\mathbf{r}, t) - \int_0^\infty \beta\chi_d(E)\nu(E')\Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)\phi(\mathbf{r}, E', t)dE' \end{aligned} \quad (\text{I.5})$$

e

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{r}, t) = \beta \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' - \lambda C(\mathbf{r}, t), \quad (\text{I.6})$$

com

$$\chi(E) = (1 - \beta) \chi_p(E) + \beta \chi_d(E) \quad (\text{I.7})$$

e

$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E, t) = \sum_{i=0}^I C_i(\mathbf{r}, t) \sigma_x^i, \quad (\text{I.8})$$

onde I é o número total de núclídeos, $\chi_p(E)$ e $\chi_d(E)$ são, respectivamente, os espectros de fissão de nêutrons prontos e atrasados. Define-se também

$$\Sigma_s = \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t). \quad (\text{I.9})$$

Para deduzir as equações de cinética pontual a partir de um tempo t_0 , é necessário conhecer o fluxo adjunto de nêutrons em $t = t_0$, ou seja, a equação adjunta da Equação (I.1) [Duderstadt e Hamilton, 1976]. A equação que governa este fluxo adjunto ($\phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)$) é da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t_0)) \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \\ & = \int_0^\infty \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0) \phi^*(\mathbf{r}, E', t_0) dE'. \end{aligned} \quad (\text{I.10})$$

Multiplicando a Equação (I.5) por $\phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)$ e a equação (I.10) por $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ e integrando as equações resultantes no volume (V) do sistema e em energia, tem-se:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{1}{v(E)} \phi(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r \right) \\ & - \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t)) dE d^3r \\ & + \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \phi(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r \\ & = \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \left(\int_0^\infty (\chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) + \Sigma_s) \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE d^3r \\ & - \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \left(\int_0^\infty \beta \chi_d(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE d^3r \\ & + \lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \chi_d(E) C(\mathbf{r}, t) dE d^3r \end{aligned} \quad (\text{I.11})$$

e

$$\begin{aligned}
& - \int_V \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, t)) dE d^3r \\
& + \int_V \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \phi^*(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r \\
& = \int_V \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \left(\int_0^\infty (\chi(E') \nu(E) \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) + \Sigma_s) \phi^*(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE d^3r.
\end{aligned} \tag{I.12}$$

Subtraindo a equação (I.12) da equação (I.11) e fazendo uso da condição de contorno em que tanto o fluxo de nêutrons quanto o fluxo adjunto são nulos na superfície do sistema, em qualquer instante, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \left(\int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t) \frac{1}{v(E)} \phi(r, E, t) dE d^3r \right) \\
& = \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t) \left(\int_0^\infty \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) + \delta \Sigma_s \right) \phi(r, E', t) dE \\
& + \nabla \cdot (\delta D(r, E, t) \nabla \phi(r, E, t) - \delta \Sigma_t(r, E, t) \phi(r, E, t)) dE d^3r \\
& - \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t) \left(\int_0^\infty \beta \chi_d(E) \nu(E') \Sigma_f(r, E', t) \phi(r, E', t) dE' \right) dE d^3r \\
& + \lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(r, E, t) \chi_d(E) C(r, t) dE d^3r,
\end{aligned} \tag{I.13}$$

onde:

$$\delta D(r, E, t) \equiv D(r, E, t) - D(r, E, t_0) \tag{I.14}$$

e

$$\delta \Sigma_x(r, E, t) \equiv \Sigma_x(r, E, t) - \Sigma_x(r, E, t_0) = \sum_{i=1}^I [C_i(r, t) - C_i(r, t_0)] \sigma_x^i(E). \tag{I.15}$$

Neste ponto, é realizada a aproximação que, durante o transiente, o fluxo de nêutrons e a concentração de precursores são da seguinte forma [Duderstadt e Hamilton, 1976]:

$$\begin{aligned}
\phi(r, E, t) & \cong f(r, E) n(t) \\
C(r, E, t) & \cong f(r, E) C(t).
\end{aligned} \tag{I.16}$$

Com isso, a equação (I.13) pode ser escrita da forma conhecida como equação de cinética pontual para a densidade de nêutrons, considerando apenas um grupo de precursores:

$$\frac{d}{dt} n(t) = \frac{\rho(t) - \bar{\beta}(t)}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t), \tag{I.17}$$

onde Λ é o tempo médio de geração entre o nascimento de nêutrons e a subsequente absorção induzindo a fissão e ρ é definida como a reatividade.

ANEXO II – Método de Decomposição de Adomian

O Anexo II apresenta a dedução do método de decomposição de Adomian apresentado por Espinosa, 2016 e criado por Adomian, 1988; 1994. O método pode ser aplicado para uma grande amplitude de problemas, por exemplo, problemas de valor de contorno, equações algébricas e equações diferenciais parciais [Biazar e Shafiof, 2007; Weymar, 2016]. Tem-se interesse nesse método, pois fornece a solução numa série que converge rapidamente. A grande vantagem do método é que ele pode ser aplicado em todos os tipos de equações diferenciais e integrais, lineares ou não-lineares, homogêneas ou não-homogêneas e com coeficientes constantes ou variáveis [Espinosa, 2016].

Considerando o sistema de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{aligned} y_1' &= f_1(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_1 \\ y_2' &= f_2(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_2 \\ &\vdots \\ y_m' &= f_m(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_m \end{aligned} \tag{II.1}$$

que pode ser escrito na forma compacta:

$$y_k' = f_k(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_k \tag{II.2}$$

para $k = 1 : m$, onde f_k são funções não-lineares e g_k são funções conhecidas. Procuram-se soluções y_1, y_2, \dots, y_m que satisfaçam o sistema de equações (II.2).

Assumindo que para qualquer g_k o sistema (II.2) possua somente uma solução, aplica-se o método da Decomposição de Adomian no sistema (II.2), e tem-se:

$$Ly_k = N_k(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_k \tag{II.3}$$

para $k = 1 : m$, onde $L = \text{frac}d dt$ é um operador linear e $N_k(y_1, y_2, \dots, y_m) = f_k(y_1, y_2, \dots, y_m)$ são operadores não lineares. Aplicando em ambos os lados de (II.3) o operador inverso de L , que neste caso é dado por $L^{-1}[\cdot] = \int_0^t [\cdot] dt$, tem-se:

$$y_k = y_k(0) + L^{-1}N_k(y_1, y_2, \dots, y_m) + L^{-1}g_k \tag{II.4}$$

para $k = 1 : m$, na qual $y_k(0)$ é a condição inicial da equação (II.1).

O método clássico da decomposição de Adomian consiste em aproximar a solução

(II.4) por uma série infinita da forma:

$$y_k = \sum_{j=0}^{\infty} y_{k,j} \quad (\text{II.5})$$

para $k = 1 : m$, decompor o operador não linear N_k como:

$$N_k(y_1, y_2, \dots, y_m) = \sum_{j=0}^{\infty} A_{k,j} \quad (\text{II.6})$$

para $k = 1 : m$, na qual $A_{k,j}$ são polinômios de y_1, y_2, \dots, y_m (II.7), chamados Polinômios de Adomian [Adomian, 1994].

$$A_{k,j} = \frac{1}{j} \left[\frac{d^j}{dw^j} N_k \left(\sum_{k=0}^j y_k w^k \right) \right] \Big|_{w=0} \quad (\text{II.7})$$

Substituindo (II.5) e (II.6) em (II.4), obtém-se:

$$\sum_{j=0}^{\infty} y_{k,j} = y_k(0) + L^{-1} \sum_{j=0}^{\infty} A_{k,j} + L^{-1} g_k \quad (\text{II.8})$$

para $k = 1 : m$. Então, escolhendo o primeiro sistema, conforme Adomian, 1994

$$y_{k0} = y_k(0) + L^{-1} g_k \quad (\text{II.9})$$

para $k = 1 : m$ e para os demais sistemas recursivos até uma ordem de truncamento como:

$$y_{k(j+1)} = L^{-1} A_{k,j} \quad (\text{II.10})$$

para $k = 1 : m$. Tem-se assim definido um procedimento recursivo, conhecido como método clássico da Decomposição de Adomian.