

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

A EQUAÇÃO UNIDIMENSIONAL DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS COM MODELO
MULTIGRUPO DE ENERGIA E MEIO HETEROGÊNEO: AVALIAÇÃO DO FLUXO
PARA PROBLEMAS ESTACIONÁRIOS E DE CINÉTICA

por

Celina Ceolin

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 2014

A EQUAÇÃO UNIDIMENSIONAL DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS COM MODELO
MULTIGRUPO DE ENERGIA E MEIO HETEROGÊNEO: AVALIAÇÃO DO FLUXO
PARA PROBLEMAS ESTACIONÁRIOS E DE CINÉTICA

por

Celina Ceolin

Mestre em Engenharia

Tese 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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Aprovada por:

Prof. Dr. Antonio Carlos Marques Alvim (UFRJ/RJ)

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros (UERJ/RJ)

Prof. Dra. Cynthia Feijó Segatto (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Rogério José Marczak

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 6 de Fevereiro de 2014

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família, especialmente aos meus pais, por sempre me apoiarem e incentivarem. Agradeço também ao meu namorado Dilvan pelo apoio e compreensão.

Agradeço ao professor Marco Tullio M. B. de Vilhena pelo conhecimento transmitido e pela valiosa orientação prestada. Agradeço também ao professor Bardo E. J. Bodmann pelos ensinamentos e sugestões.

Ao CNPq pelo suporte financeiro e à UFRGS e ao PROMEC representados por seus funcionários e docentes.

Agradeço também a todos colegas que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

A EQUAÇÃO UNIDIMENSIONAL DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS COM MODELO MULTIGRUPO DE ENERGIA E MEIO HETEROGÊNEO: AVALIAÇÃO DO FLUXO PARA PROBLEMAS ESTACIONÁRIOS E DE CINÉTICA

Na presente tese é resolvida a equação de difusão de nêutrons estacionária, bem como problemas de cinética, em geometria unidimensional cartesiana multi-região considerando o modelo de multigrupos de energia. Um dos objetivos e inovação neste trabalho é a obtenção de uma solução aproximada com estimativa de erro, controle de precisão e na forma de uma expressão analítica. Com esse tipo de solução não há a necessidade de recorrer a esquemas de interpolação, geralmente necessários em caso de discretizações do domínio. O fluxo de nêutrons é expandido em uma série de Taylor cujos coeficientes são encontrados utilizando a equação diferencial e as condições de contorno e interface. O domínio é dividido em várias células, cujo tamanho e o grau do polinômio são ajustáveis de acordo com a precisão requerida. Para resolver o problema de autovalor é utilizado o método da potência. A metodologia é aplicada em um *benchmark* que consiste na solução da equação de difusão como condição inicial e na solução de problemas de cinética para diferentes transientes. Os resultados são comparados com sucesso com resultados da literatura. A convergência da série é garantida pela aplicação de um raciocínio baseado no critério de Lipschitz para funções contínuas. Cabe ressaltar que a solução obtida, em conjunto com a análise da convergência, mostra a solidez e a precisão dessa metodologia.

Autor: Celina Ceolin

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 2014.

ABSTRACT

THE ONE DIMENSIONAL DIFFUSION EQUATION WITH MULTI GROUP ENERGY MODEL AND HETEROGENEOUS MEDIA: FLUX EVALUATION TO STATIONARY AND KINETIC PROBLEMS

In the present dissertation the one-dimensional neutron diffusion equation for stationary and kinetic problems in a multi-layer slab has been solved considering the multi-group energy model. One of the objectives and innovation in this work is to obtain an approximate solution with error estimation, accuracy control and in the form of an analytical expression. With this solution there is no need for interpolation schemes, which are usually needed in case of discretization of the domain. The neutron flux is expanded in a Taylor series whose coefficients are found using the differential equation and the boundary and interface conditions. The domain is divided into several layers, whose size and the polynomial order can be adjusted according to the required accuracy. To solve the eigenvalue problem the conventional power method has been used. The methodology is applied in a benchmark problem consisting of the solution of the diffusion equation as an initial condition and solving kinetic problems for different transients. The results are compared successfully with the ones in the literature. The convergence of the series is guaranteed by applying a criterion based on the Lipschitz criterion for continuous functions. Note that the solution obtained, together with the convergence analysis, shows the robustness and accuracy of this methodology.

Author: Celina Ceolin

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 2014.

ÍNDICE

| | | |
|----------|-----------------------------------------------------------------------|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 1 |
| 2 | MODELOS FÍSICO-MATEMÁTICOS PARA O TRANSPORTE DE NÊUTRONS | 5 |
| 2.1 | Modelo da difusão | 6 |
| 2.1.1 | Difusão em meios multiplicativos | 9 |
| 2.1.2 | O modelo de multigrupos de energia | 11 |
| 2.2 | Modelo cinético de difusão | 14 |
| 3 | METODOLOGIA DE SOLUÇÃO VIA SÉRIE DE TAYLOR | 18 |
| 3.1 | Solução da equação de difusão estacionária | 18 |
| 3.1.1 | O Método da Potência | 19 |
| 3.1.2 | A Expansão em Série de Taylor | 20 |
| 3.1.3 | Análise da Convergência | 26 |
| 3.2 | Solução da equação cinética de difusão | 28 |
| 4 | RESULTADOS NUMÉRICOS | 40 |
| 4.1 | Caso 1: Difusão estacionária | 40 |
| 4.2 | Caso 2: Cinética de difusão | 43 |
| 4.2.1 | Caso 2a: transiente do tipo rampa positiva | 43 |
| 4.2.2 | Caso 2b: transiente do tipo rampa negativa | 45 |
| 4.2.3 | Caso 2c: transiente do tipo senoidal | 47 |
| 4.2.4 | Caso 2d: transiente do tipo mudança instantânea | 49 |
| 5 | CONCLUSÃO | 51 |
| | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 52 |

ÍNDICE DE FIGURAS

| | | |
|------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| 4.1 | Fluxo de nêutrons para o caso estacionário. | 42 |
| 4.2 | Fluxo de nêutrons rápidos para um transiente do tipo rampa positiva. | 44 |
| 4.3 | Fluxo de nêutrons térmicos para um transiente do tipo rampa positiva. | 44 |
| 4.4 | Potência normalizada para um transiente do tipo rampa positiva. | 45 |
| 4.5 | Fluxo de nêutrons rápidos para um transiente do tipo rampa negativa. | 46 |
| 4.6 | Fluxo de nêutrons térmicos para um transiente do tipo rampa negativa. | 46 |
| 4.7 | Potência normalizada para um transiente do tipo rampa negativa. | 47 |
| 4.8 | Fluxo de nêutrons rápidos para um transiente do tipo senoidal. | 48 |
| 4.9 | Fluxo de nêutrons térmicos para um transiente do tipo senoidal. | 48 |
| 4.10 | Potência total normalizada para um transiente do tipo senoidal. | 49 |
| 4.11 | Fluxo de nêutrons para um transiente do tipo mudança instantânea em Σ_{f2} para t=1s. | 50 |
| 4.12 | Potência normalizada para um transiente do tipo mudança instantânea. | 50 |

ÍNDICE DE TABELAS

| | | |
|-----|----------------------------------------------------------------------------|----|
| 2.1 | Constantes referentes ao Urânio-235 [Duderstadt e Hamilton, 1976]. | 15 |
| 4.1 | Parâmetros nucleares [Quintero-Leyva, 2010] | 40 |
| 4.2 | Cálculo do Δx | 41 |
| 4.3 | Resultados numéricos para o k e para a Fração de Potência | 42 |
| 4.4 | Parâmetros dos nêutrons atrasados [Quintero-Leyva, 2010]. | 43 |

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

| | |
|-----------------|-------------------------------------------------------|
| A | massa atômica |
| A_{gj}^{ℓ} | coeficientes da expansão em série |
| B_{nj} | coeficientes da condição inicial |
| D_g | coeficiente de difusão [cm] para o grupo g |
| C_i | concentração do precursor do grupo i |
| ${}^{12}_6C$ | Carbono-12 |
| E | energia dos nêutrons [MeV] |
| f | função genérica |
| \mathbf{F} | matriz com os termos de fissão do método da potência |
| g | grupo de energia |
| G | número de grupos de energia |
| 1_1H | Hidrogênio |
| i | grupo de precursores de nêutrons atrasados |
| I | número de grupos de precursores de nêutrons atrasados |
| \mathbf{J} | corrente de nêutrons |
| J | número de termos da série de potências |
| k | fator de multiplicação efetivo |
| L | número de células |
| \mathbf{M} | matriz de coeficientes do método da potência |
| N | ordem de truncamento da série |
| P | potência gerada prescrita |
| \hat{P} | potência calculada |
| ${}^{239}Pu$ | Plutônio-239 |
| Q_{ng} | constantes dos coeficientes $A_{gj}^{[\ell, \tau]}$ |
| \mathbf{r} | vetor posição espacial [cm] |
| r | região |
| R | número de regiões |

| | |
|-------------------|--------------------------------------------------|
| S | fonte externa de nêutrons [$cm^{-3}s^{-1}$] |
| t | variável temporal [s] |
| t_c^ℓ | centro do intervalo τ |
| ^{235}U | Urânio-235 |
| ^{238}U | Urânio-238 |
| v | velocidade dos nêutrons [cm/s] |
| V | volume definido pelas fronteiras de \mathbf{r} |
| x_c^ℓ | centro da célula ℓ |
| $Y^{[\ell,\tau]}$ | vetor solução |

2. Caracteres Gregos

| | |
|-----------------|-------------------------------------------------------------------------|
| β | fração total de nêutrons atrasados |
| β_i | fração de nêutrons atrasados para o i-ésimo grupo |
| ϵ_k | critério de parada para os autovalores do método da potência |
| ϵ_ϕ | critério de parada para os autovetores do método da potência |
| ε | critério para ordem de truncamento da série |
| κ | critério que assegura a convergência da série |
| λ_i | constante de decaimento do precursor do i-ésimo grupo [s^{-1}] |
| λ_{tr} | livre caminho médio de transporte [cm] |
| $\bar{\mu}$ | cosseno do ângulo de espalhamento |
| ν | número médio de nêutrons emitidos na fissão |
| Σ_a | seção de choque macroscópica de absorção [cm^{-1}] |
| Σ_f | seção de choque macroscópica de fissão [cm^{-1}] |
| Σ_r | seção de choque macroscópica de remoção [cm^{-1}] |
| Σ_s | seção de choque macroscópica de espalhamento [cm^{-1}] |
| Σ_{s21} | seção de choque de espalhamento do grupo 2 para o grupo 1 [cm^{-1}] |
| Σ_{s12} | seção de choque de espalhamento do grupo 1 para o grupo 2 [cm^{-1}] |
| Σ_t | seção de choque macroscópica total [cm^{-1}] |
| Σ_{tr} | seção de choque macroscópica de transporte [cm^{-1}] |
| τ | intervalo de tempo |
| ϕ | fluxo escalar de nêutrons [$cm^{-2}s^{-1}$] |
| φ | fluxo angular de nêutrons [$cm^{-2}s^{-1}$] |
| χ | espectro de fissão |
| χ_g^p | espectro de fissão dos nêutrons prontos para o grupo g |
| χ_g^d | espectro de fissão dos nêutrons atrasados para o grupo g |
| $\hat{\Omega}$ | o vetor unitário da direção das partículas |
| ψ | vetor solução do método da potência |

1. INTRODUÇÃO

O estudo da evolução espaço-temporal dos nêutrons em sistemas nucleares se mostra como um desafio tanto físico quanto matemático e constitui um tópico fundamental na pesquisa na área de cinética de reatores nucleares. Esse estudo, dentre outras aplicações, propõe métodos de análise para prever o comportamento do reator durante diferentes tipos de transientes. A descrição do comportamento dos nêutrons implica numa série de dificuldades, devido ao fato de que os nêutrons prontos, emitidos diretamente da fissão, reagem a perturbações quase instantaneamente, enquanto os nêutrons atrasados, provenientes do decaimento radioativo dos produtos da fissão, reagem bem mais lentamente a essas perturbações ou alterações no regime. Para o caso de um reator térmico, as escalas de tempo relacionadas aos nêutrons prontos são da ordem de 10^{-4} a 10^{-6} segundos e para os nêutrons atrasados são da ordem de 10^{-1} a 10^1 segundos. Mesmo representando menos de 1% do total de nêutrons produzidos, os nêutrons atrasados desempenham um importante papel na segurança e operação de um reator nuclear, pois retardam a resposta do reator a uma determinada perturbação, facilitando o controle da reação em cadeia. Essa característica, da existência simultânea de diferentes escalas de tempo, do ponto de vista matemático, confere um caráter de rigidez ao problema de cinética fazendo com que métodos numéricos tradicionalmente utilizados tenham limitações quanto à precisão e impulsiona a busca por soluções analíticas ou que forneçam resultados mais precisos e com menor tempo computacional.

A descrição completa da população de nêutrons é dada pela equação de transporte de Boltzmann dependente do tempo incluindo os nêutrons atrasados [Duderstadt e Hamilton, 1976; Keepin, 1965], porém esta equação além de ser difícil de ser resolvida, possui muitas informações que são irrelevantes na operação de um reator, então, soluções exatas são encontradas para modelos simplificados baseados em hipóteses físicas adequadas. O modelo aproximativo mais simples é o da cinética pontual, no qual o fluxo de nêutrons é considerado como o produto de uma função forma espacial (modo fundamental) independente do tempo e uma amplitude dependente do tempo [Keepin, 1965]. Contudo, em diversas situações, como

por exemplo em sistemas onde existe o domínio de uma fonte externa [Ravetto et al., 2004; Maiorino et al., 2007; Ait-Abderrahim e Stanculescu, 2006], o fluxo de nêutrons não pode ser representado unicamente por um modo espacial fundamental, devendo sim ser representado pela soma de todas as autofunções relacionadas ao operador. Então, como transientes induzidos por perturbações localizadas podem produzir mudanças espaciais e espectrais na distribuição de nêutrons e a cinética pontual não é adequada para a análise de tais perturbações, é necessário um modelo dependente da energia, espaço e tempo [Gaboury, 1993]. Portanto, a motivação por trás do desenvolvimento de soluções para as equações de cinética dependentes do tempo e do espaço não é somente pelo desafio de resolver um sistema grande de equações diferenciais parciais acopladas, mas também pela necessidade de avaliar a segurança de reatores comerciais de grande porte.

Enquanto a solução do problema homogêneo pode ser obtida simplesmente por uma expansão em termos de autofunções [Ceolin, 2010], o problema em meio heterogêneo, por sua vez, introduz muitas complicações adicionais e é descrito por algumas características físicas e matemáticas que requerem uma abordagem específica. Mesmo assim, é válido considerar este tipo de problema. Com o passar dos anos foram desenvolvidos inúmeros métodos para tratar deste assunto. Estes métodos podem ser divididos em duas categorias principais: métodos diretos e indiretos. Os métodos diretos utilizam os métodos de discretização de problemas estacionários para tratar a dependência espacial, e resolvem a dependência no tempo. São exemplos os métodos de diferenças finitas [Nahla et al., 2012; Alcouffe e Albrecht, 1970], malha grossa [Orellana e Barros, 2002] e nodais [Grossman e Hennart, 2007; Barros et al., 2003]. Os métodos indiretos baseiam-se na ideia de separar a parte espacial da parte temporal. São exemplos os métodos modais [Lima et al., 2009; Stacey, 1967] e de síntese [Kaplan et al., 1964b]. Mais detalhes sobre esses métodos podem ser encontrados nos artigos de Sutton e Aviles [Sutton e Aviles, 1996] e de Adams [Adams, 1977]. Métodos numéricos e analíticos foram resumidos em uma revisão feita por Kaplan et al. [Kaplan et al., 1964a] e no livro de Alvim [Alvim, 2007], este último com foco nos métodos numéricos.

A maioria dos estudos em teoria de reatores nucleares trata o transporte de nêutrons como um processo difusivo [Duderstadt e Hamilton, 1976]. Embora esse tipo de tratamento tenha validade limitada, essa aproximação é considerada apropriada para muitas aplicações. Com base nisso, na presente tese, inicialmente resolve-se a equação de difusão de nêutrons

estacionária em geometria unidimensional cartesiana multi-região considerando o modelo de multigrupos de energia. Um dos objetivos e inovação neste trabalho é a obtenção de uma solução aproximada com estimativa de erro, controle de precisão e na forma de uma expressão analítica. Com esse tipo de solução não há a necessidade de recorrer a esquemas de interpolação, que geralmente são necessários como consequência de abordagens com a discretização do domínio. O método utilizado para a solução é baseado em uma expansão em uma série de Taylor [Barrio et al., 2011; Boyce e DiPrima, 2001; Corliss e Chang, 1982]. Métodos baseados nesse tipo de expansão têm sido amplamente utilizados na solução de problemas em cinética pontual [Nahla e Zayed, 2010; Nahla, 2011; Mitchell, 1977]. O objetivo de resolver a equação de difusão estacionária é encontrar uma condição inicial para problemas de cinética que serão resolvidos posteriormente. Então, para resolver a equação de difusão, o fluxo escalar de nêutrons é expandido em uma série de potências e os coeficientes dessa expansão são encontrados utilizando a equação diferencial ordinária juntamente com as condições de contorno e interface. Divide-se o domínio em várias células para garantir a convergência com uma baixa ordem de truncamento da série de Taylor. Em cada célula a solução é aproximada através de um polinômio. As soluções de cada célula são unidas utilizando as condições de interface (continuidade de corrente e fluxo de nêutrons). O tamanho de cada célula, bem como o grau do polinômio são ajustáveis de acordo com a precisão requerida. A fim de resolver o problema de autovalor e assim calcular o coeficiente de multiplicação efetivo k , utiliza-se o método da potência [Duderstadt e Hamilton, 1976].

O próximo passo é resolver as equações cinéticas de difusão incluindo os nêutrons atrasados para diferentes tipos de transientes. O procedimento utilizado é similar, ou seja, os fluxos escalares de nêutrons bem como as concentrações de precursores são expandidos em séries de potências, tanto para a variável espacial quanto para a variável temporal. Novamente são utilizadas as equações diferenciais e as condições de contorno e interface para calcular os coeficientes da expansão. A condição inicial utilizada é a solução encontrada para a equação de difusão estacionária obtida anteriormente pela mesma metodologia. Essa é outra vantagem desse método, pois permite a utilização do mesmo procedimento para o cálculo da condição inicial e também para o problema transiente.

A metodologia proposta é aplicada em um *benchmark* do *Argonne National Laboratory* [National Energy Software Center, 1985] descrito por Pollard [Pollard, 1977] e Aviles

[Aviles, 1991]. Esse *benchmark* consiste na solução da equação de difusão como condição inicial bem como a solução de problemas de cinética para três tipos de transientes: rampa positiva, rampa negativa e senoidal. Além desses, mais um transiente é considerado: uma mudança instantânea na seção de choque de fissão. Os resultados obtidos neste trabalho são comparados com sucesso com os resultados obtidos por Quintero-Leyva [Quintero-Leyva, 2010].

A solução obtida fornece a informação necessária para obter o valor do fluxo de nêutrons em qualquer ponto do domínio com controle do erro. Essa metodologia é quase tão simples quanto um algoritmo de diferenças finitas, com a vantagem de ser uma solução contínua com controle de erro, ao invés de uma solução discreta que geralmente necessita de interpolação. A convergência da série é garantida pela aplicação de um raciocínio baseado no critério de Lipschitz para funções contínuas [Searcoid, 2007], através de uma estimativa de solução inferior e superior a um ponto onde a solução é exata, dentro do sub-domínio.

Cabe ressaltar que a solução obtida por essa metodologia nos fornece uma representação analítica da solução da equação de difusão estacionária e de cinética e os resultados, em conjunto com a análise da convergência, mostram a solidez e a precisão dessa metodologia, que também pode ser utilizada no futuro para a aplicação em problemas multidimensionais, por exemplo.

A presente tese encontra-se estruturada da seguinte maneira: no capítulo 2, são apresentados os modelos físico-matemáticos que serviram de base para nosso estudo. No capítulo 3, a metodologia utilizada para a solução dos problemas propostos é apresentada. No capítulo 4, são mostradas as aplicações da metodologia para diferentes casos bem como os resultados obtidos e suas análises. Por fim, no capítulo 6 encontram-se as conclusões e as sugestões para trabalhos futuros.

2. MODELOS FÍSICO-MATEMÁTICOS PARA O TRANSPORTE DE NÊUTRONS

O problema central da física de reatores nucleares é a determinação da distribuição de nêutrons no reator. Pelo estudo do comportamento temporal da população de nêutrons somos capazes de inferir sobre a estabilidade da reação de fissão em cadeia. Para modelar a distribuição de nêutrons no reator devemos investigar o processo de transporte de nêutrons, cuja descrição matemática em um determinado meio material é baseada na equação de balanço chamada equação de transporte de nêutrons. Esta equação representa o balanço entre produção e perda de partículas num elemento do espaço de fase $(d\mathbf{r}, dE, d\hat{\Omega})$, sendo \mathbf{r} o vetor posição (com componentes x , y e z), E é a energia e $\hat{\Omega}$ representa o vetor unitário que indica a direção do movimento. A equação de transporte de nêutrons em termos do fluxo angular φ é dada por:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \varphi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) \\ &= \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \varphi(\mathbf{r}, E', \hat{\Omega}', t) + s(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t), \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde v é a velocidade, Σ_t é a seção de choque macroscópica total, Σ_s é a seção de choque macroscópica de espalhamento e $s(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ representa uma fonte de nêutrons presente no domínio, que pode ser prescrita ou incluir fissão. Na equação (2.1) os termos à esquerda da igualdade representam respectivamente as fugas do elemento de volume considerado bem como as perdas por colisão, enquanto que nos termos à direita estão representados os ganhos pelo espalhamento de nêutrons com energia E' e direção $\hat{\Omega}'$ para a energia E e direção $\hat{\Omega}$, e pela fonte que pode ser externa, que é a fonte que não depende das colisões de nêutrons no sistema, ou por fissão.

Nota-se que essa equação contém derivadas na variável espacial e temporal, bem como integrais na variável angular e na energia, o que a caracteriza como uma equação

integro-diferencial. Além disso, a variável dependente φ possui 7 variáveis independentes, 3 de espaço, 1 de energia, 2 de ângulo e mais a temporal.

Sendo assim, a solução dessa equação é muito complicada, principalmente devido à forte dependência das seções de choque com a energia, e soluções exatas são encontradas apenas para modelos simplificados. Por isso, utiliza-se uma aproximação da equação de transporte conhecida como equação de difusão, onde o movimento dos nêutrons é tratado como um processo no qual os nêutrons tendem a se difundir de regiões de alta densidade para regiões de baixa densidade. O tratamento do transporte de nêutrons como um processo difusivo tem validade limitada (essa validade será melhor discutida na seção 2.1), porém essa aproximação é considerada adequada para muitas aplicações em reatores.

Sabe-se também que a fissão nuclear dá origem a fragmentos que são elementos com menor número de massa do que o nuclídeo original. Alguns desses fragmentos são instáveis e no processo de decaimento eles emitem nêutrons. Tais nêutrons que são emitidos após o processo da fissão são chamados de nêutrons atrasados e os nuclídeos que os emitem são chamados de precursores de nêutrons atrasados. O modelo da difusão incluindo a contribuição dos nêutrons atrasados é conhecido como modelo da cinética de reatores nucleares.

Nas seções seguintes serão apresentados com mais detalhes os modelos da difusão e da cinética, cuja solução das equações é objetivo deste trabalho.

2.1 Modelo da difusão

Para a maioria dos cálculos em física de reatores os detalhes da dependência angular do fluxo de nêutrons não são necessários, é importante saber apenas o fluxo integrado na variável angular, ou seja, o fluxo escalar:

$$\phi(\mathbf{r}, E, t) = \int_{4\pi} \varphi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}. \quad (2.2)$$

Então, podemos formular uma equação para $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ integrando a equação (2.1) na variável angular, ou seja, aplicando o operador:

$$\int_{4\pi} \cdot \hat{\Omega}. \quad (2.3)$$

Fazendo isso, obtemos a equação da continuidade de nêutrons:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, E, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, t) = \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E', t) + S(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.4)$$

onde:

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = \int_{4\pi} d\hat{\Omega} \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi = \nabla \cdot \int_{4\pi} d\hat{\Omega} \hat{\Omega} \varphi, \quad (2.5)$$

sendo \mathbf{J} a corrente de nêutrons.

Ao removermos a dependência angular, introduzimos uma nova variável dependente $\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$, o que nos leva a um problema indeterminado, com 1 equação e 2 incógnitas. Sabemos que não é possível relacionar a corrente $\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$ e o fluxo escalar $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ de forma geral e exata. Então, se faz necessária uma relação aproximativa que permita escrever a corrente de nêutrons, que é uma grandeza vetorial, em função do fluxo escalar de nêutrons, para que a equação seja descrita em termos de apenas uma incógnita. Para isso, utiliza-se a *Lei de Fick*, a qual foi originalmente usada na química. Essa lei mostra que, se a concentração de um soluto é maior em uma região da solução do que em outra, o soluto se difunde da região de maior concentração para a região de menor concentração. Além disso, também afirma que a taxa de fluxo do soluto é proporcional ao negativo do gradiente da concentração do soluto. Esta é a afirmação original dessa lei.

O comportamento dos nêutrons é considerado como sendo similar ao do soluto na solução. Assim, se a densidade ou fluxo de nêutrons é maior em uma parte do reator, há um fluxo líquido de nêutrons dentro da região de menor densidade. Matematicamente, essa hipótese pode ser escrita da seguinte forma:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) \cong -D(\mathbf{r}, E) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.6)$$

onde a constante de proporcionalidade $D(\mathbf{r}, E)$, que é dada em *cm*, é conhecida como coeficiente de difusão e é definida pela seguinte relação:

$$D(\mathbf{r}, E) = \frac{\lambda_{tr}(\mathbf{r}, E)}{3}, \quad (2.7)$$

onde λ_{tr} é chamado de *livre caminho médio de transporte*, e é dado por:

$$\lambda_{tr}(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E)} = \frac{1}{\Sigma_t(\mathbf{r}, E) - \bar{\mu}\Sigma_s(\mathbf{r}, E)}, \quad (2.8)$$

na equação (2.8), Σ_{tr} é chamada de seção de choque macroscópica de transporte, Σ_t é a seção de choque macroscópica total, Σ_s é a seção de choque macroscópica de espalhamento do meio e $\bar{\mu}$ é o valor aproximado do cosseno do ângulo no qual os nêutrons são espalhados no meio. O valor de $\bar{\mu}$ para a maioria dos nêutrons com energias de interesse nos cálculos pode ser computado pela fórmula:

$$\bar{\mu} = \frac{2}{3A}, \quad (2.9)$$

onde A é o número de massa atômica do meio, considerando núcleos pesados em relação ao nêutron.

Vale ressaltar que a Lei de Fick foi construída com base em aproximações, logo, seu uso possui limitações, tais como em regiões próximas à fonte ou às fronteiras do meio e para meios fortemente absorvedores. No entanto, essa teoria apresenta resultados bastante razoáveis mesmo envolvendo problemas onde na teoria essa aproximação não seria válida.

Por fim, a equação da difusão de nêutrons pode ser escrita substituindo a Lei de Fick apresentada na equação (2.6) na equação da continuidade (2.4). Como resultado dessa substituição obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, E, t) - \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, t) \\ = \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E', t) + S(\mathbf{r}, E, t). \end{aligned} \quad (2.10)$$

2.1.1 Difusão em meios multiplicativos

Meios multiplicativos são meios materiais onde reações entre nêutrons e núcleos-alvo podem gerar mais nêutrons, como por exemplo, através da fissão nuclear, e assim estabelecer uma reação em cadeia. Em seguida vamos analisar como ocorrem os eventos envolvendo uma reação em cadeia em um reator térmico. Os nêutrons gerados por fissão nascem com uma energia alta na escala MeV e são chamados de nêutrons rápidos. É possível que esses nêutrons causem fissões em isótopos físséis, como ^{235}U ou ^{239}Pu , ou fissionáveis, como ^{238}U . Mas o mais provável é que os nêutrons rápidos sejam moderados para energias mais baixas através de espalhamentos elásticos em colisões com um material moderador composto por um núcleo leve, como 1_1H ou $^{12}_6C$. Ao serem moderados, os nêutrons oriundos da fissão passam por energias comparáveis com a energia de ressonância por absorção em núcleos pesados e têm uma probabilidade de serem absorvidos. Durante o processo de moderação eles podem também eventualmente escapar do núcleo do reator. Contudo, em um reator térmico, cerca de 85 – 90% dos nêutrons vão ser moderados para energias na escala térmica. Os nêutrons então, se difundem no meio até escaparem ou serem absorvidos. Se eles forem absorvidos no combustível, poderão induzir uma nova fissão, repetindo assim todo o ciclo.

Em física de reatores existe um parâmetro que é extremamente importante e fundamental na modelagem matemática dos fenômenos físicos que ocorrem na operação de um reator nuclear. Este parâmetro recebe o nome de *fator de multiplicação efetivo* e é definido como:

$$k = \frac{\text{número de nêutrons em uma geração}}{\text{número de nêutrons na geração anterior}}. \quad (2.11)$$

Se $k = 1$, dizemos que o reator nuclear está no estado *crítico*, pois o número de nêutrons é sempre o mesmo com o passar das gerações. Se $k < 1$, dizemos que o reator está *subcrítico*, pois o número de nêutrons decresce de geração para geração. Se $k > 1$, dizemos que o reator está *supercrítico*, já que o número de nêutrons cresce em cada geração e a reação em cadeia vai multiplicando nêutrons sem limite.

O fator de multiplicação efetivo também pode ser definido como:

$$k = \frac{\text{taxa de produção de nêutrons no reator}}{\text{taxa de remoção de nêutrons no reator}}. \quad (2.12)$$

O estado de criticalidade de um sistema é atingido quando um fluxo de nêutrons independente do tempo pode ser estabelecido na ausência de outras fontes senão a fissão, ou seja, a taxa de produção de nêutrons é igual a taxa de remoção, sendo assim $k = 1$. Para fins de cálculo de criticalidade, consideremos a equação de difusão estacionária para nêutrons monoenergéticos:

$$-\nabla D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = \nu\Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}), \quad (2.13)$$

onde Σ_a é a seção de choque de absorção, ν é o número médio de nêutrons emitidos por fissão e Σ_f é a seção de choque de fissão.

Essa equação não tem solução de relevância física para os casos gerais realísticos, a não ser que se consiga a combinação exata da composição e geometria do reator para que o mesmo esteja crítico. Portanto, o que se faz é introduzir um parâmetro arbitrário k na equação (2.13) de tal forma que:

$$-\nabla D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{k}\nu\Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Logo, para algum valor de k , podemos garantir que a equação da difusão terá uma solução de relevância física. Se $k = 1$, então a equação (2.14) se reduz à equação (2.13) e, portanto, temos um sistema crítico. Se $k \neq 1$, entretanto, precisamos escolher uma nova combinação entre dimensão e composição para atingirmos a criticalidade. Há, em geral, um conjunto de autovalores k_n para a equação (2.14), contudo, apenas o maior dos autovalores, ou seja, o autovalor dominante corresponderá a uma autofunção que é não-negativa em todos os pontos do sistema, ou seja, fisicamente relevante. Definimos esse autovalor dominante como o fator de multiplicação efetivo que indicará se o sistema está em estado subcrítico, crítico ou supercrítico.

2.1.2 O modelo de multigrupos de energia

Os nêutrons tem um espectro amplo de energia, variando de uma fração de eV até alguns MeV . Nós sabemos que a energia é uma variável contínua, porém no modelo de multigrupos ela é tratada como uma variável discreta. O domínio energético dos nêutrons é discretizado em intervalos ou grupos, como no esquema abaixo:

$$E_0 > E_1 > \dots > E_{G-1} > E_G.$$

Nota-se que se usa uma notação em ordem decrescente dos índices, ou seja, do maior para o menor, pois fisicamente o nêutron geralmente perde energia durante sua meia-vida.

Definimos os fluxos discretizados como as integrais de $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ no interior de cada grupo de energia, de tal forma que $\phi_g(\mathbf{r}, t)$ represente o fluxo escalar de todos os nêutrons com energia E no grupo $E_g < E < E_{g-1}$. As equações para $\phi_g(\mathbf{r}, t)$ para $g = 1, \dots, G$ terão a forma de um sistema de equações de difusão que irão descrever os nêutrons em cada grupo de energia. Essas equações serão acopladas, já que os nêutrons podem sofrer mudanças de energia e passar de um grupo para outro, como quando nascem em grupos de alta energia e vão passando para grupos de menor energia à medida que sofrem colisões com núcleos mais leves durante o processo de moderação.

Vamos reconsiderar a equação da difusão dependente da energia (2.10) agora tornando explícita a fonte de fissão:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, E, t) - \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) + \\ \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, t) = \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E', t) + \\ \chi(E) \int_0^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E', t) + S(\mathbf{r}, E, t). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Aqui, $\chi(E)$ representa o espectro de nêutrons prontos emitidos na fissão com energia E , $\Sigma_f(\mathbf{r}, E)$ é a seção de choque macroscópica de fissão e $S(\mathbf{r}, E, t)$ é uma fonte externa conhecida.

Para eliminar a variável energia da equação (2.15), integram-se todos os termos no

g-ésimo grupo de energia, definido pelos limites $E_g < E < E_{g-1}$, com $g = 1, \dots, G$:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \frac{1}{v(E)} \phi(\mathbf{r}, E, t) dE - \int_{E_g}^{E_{g-1}} \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) dE \\
& + \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E, t) dE = \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E', t) \\
& + \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) dE \int_0^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E') \phi(\mathbf{r}, E', t) + \int_{E_g}^{E_{g-1}} S(\mathbf{r}, E, t) dE. \quad (2.16)
\end{aligned}$$

Após assumir a separabilidade energética no g-ésimo grupo de energia, ou seja, considerando $\phi(\mathbf{r}, E, t) = \varphi(E)\psi(\mathbf{r}, t)$, resolvendo as integrais e utilizando algumas definições [Duderstadt e Hamilton, 1976], podemos escrever as equações de multigrupo de difusão:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) - \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{t,g}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}, t) \\
& = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g'g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \chi_g \sum_{g'=1}^G [\nu \Sigma_f(\mathbf{r})]_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + S_g(\mathbf{r}, t), \quad (2.17)
\end{aligned}$$

para $g = 1, 2, \dots, G$.

Cálculos precisos de célula são feitos tipicamente com até 150 grupos de energia para se obterem as seções de choque médias de cada grupo. Então, aproximações de poucos grupos são usadas para cálculos globais baseados nessas seções de choque médias calculadas. Cálculos com poucos grupos podem ser muito adequados desde que os cálculos das seções de choque médias de cada grupo tenham sido realizados com técnicas mais sofisticadas [Camargo et al., 2013].

Em reatores nucleares a energia do nêutron incidente é substancialmente maior do que a energia térmica do núcleo-alvo, logo ele não ganha energia em uma colisão de espalhamento. Esses nêutrons rápidos serão moderados para energias menores através de colisões, portanto, assumimos que:

$$\Sigma_{s,g'g} = 0, \quad \text{para } g' > g. \quad (2.18)$$

Já que a maioria dos cálculos de poucos grupos utiliza somente um grupo térmico

para descrever nêutrons com $E < 1 \text{ eV}$ (assumindo que os nêutrons não se espalharão para grupos de energia maior), podemos simplificar o termo de espalhamento da seguinte forma:

$$\sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g'g} \phi_{g'} = \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{s,g'g} \phi_{g'} + \Sigma_{s,gg} \phi_g. \quad (2.19)$$

Aqui, tivemos o cuidado de separar o termo de espalhamento intra-grupo $\Sigma_{s,gg}$, que caracteriza os espalhamentos nos quais os nêutrons perdem uma quantidade suficientemente pequena de energia para que eles ainda permaneçam no mesmo grupo. É comum se transferir este termo para o lado esquerdo da equação (2.17) e assim definir a seção de choque de remoção:

$$\Sigma_{rg} \equiv \Sigma_{t,g} - \Sigma_{s,gg}, \quad (2.20)$$

que caracteriza a probabilidade de um nêutron ser removido do grupo g de energia por uma colisão.

Incluindo as hipóteses dadas pelas equações (2.18), (2.19) e (2.20) na equação (2.17) e eliminando a fonte externa, obtemos:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) - \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{rg}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}, t) \\ & = \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{s,g'g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \chi_g \sum_{g'=1}^G [\nu \Sigma_f(\mathbf{r})]_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.21)$$

para $g = 1, 2, \dots, G$.

No geral, em cálculos globais de reatores nucleares, como cálculos de criticalidade, a dependência temporal pode ser ignorada, sendo assim, consideremos o seguinte problema de autovalor:

$$\begin{aligned} & -\nabla \cdot D_g(\mathbf{r}) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{rg}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}, t) \\ & = \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{s,g'g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \frac{1}{k} \chi_g \sum_{g'=1}^G [\nu \Sigma_f(\mathbf{r})]_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde $g = 1, 2, \dots, G$ e k é o autovalor. A equação (2.22) forma um sistema de G equações diferenciais acopladas, cuja solução é o fluxo escalar de nêutrons no núcleo do reator. O autovalor dominante é definido como o fator de multiplicação efetivo k . A solução da equação (2.22) será apresentada na seção 3.1.

2.2 Modelo cinético de difusão

A fissão nuclear dá origem a fragmentos que são elementos com menor número de massa do que o nuclídeo original. Alguns desses fragmentos são instáveis e no processo de decaimento eles emitem nêutrons. Tais nêutrons que são emitidos após o processo da fissão são chamados de nêutrons atrasados e os nuclídeos que os emitem são chamados de precursores de nêutrons atrasados.

Os nêutrons atrasados não têm as mesmas propriedades que os nêutrons prontos produzidos diretamente da fissão. A energia média dos nêutrons prontos é de aproximadamente 2 MeV . Este valor é muito maior do que a energia média dos nêutrons atrasados, que é de aproximadamente $0,5 \text{ MeV}$. O fato de os nêutrons atrasados nascerem com energias mais baixas tem dois impactos significantes na maneira que eles procedem no ciclo de vida do nêutron. Primeiramente, os nêutrons atrasados têm uma probabilidade muito menor de causar fissões rápidas do que os nêutrons prontos, devido ao fato de que sua energia média está abaixo do mínimo requerido para a ocorrência da fissão rápida. Em segundo lugar, os nêutrons atrasados têm uma probabilidade menor de fuga do núcleo, porque eles nascem com baixas energias e conseqüentemente viajam distâncias mais curtas do que os nêutrons rápidos.

Os produtos de fissão que emitem nêutrons atrasados foram reunidos, por conveniência, em 6 grupos de acordo com sua meia-vida. A tabela 2.1 mostra a fração de nêutrons atrasados para cada grupo de um combustível comumente usado em reatores nucleares térmicos.

Tabela 2.1: Constantes referentes ao Urânio-235 [Duderstadt e Hamilton, 1976].

| Grupo | Meia-vida [s] | Constante de decaimento λ_i [s^{-1}] | Fração β_i |
|-------|---------------|--------------------------------------------------|------------------|
| 1 | 55,72 | 0,0124 | 0,000215 |
| 2 | 22,72 | 0,0305 | 0,001424 |
| 3 | 6,22 | 0,111 | 0,001274 |
| 4 | 2,30 | 0,301 | 0,002568 |
| 5 | 0,61 | 1,14 | 0,000748 |
| 6 | 0,23 | 3,01 | 0,000273 |

Sendo β a fração total de nêutrons atrasados dada por:

$$\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i, \quad (2.23)$$

então, neste caso (tabela 2.1), $\beta = 0,0065$, ou seja, os nêutrons atrasados correspondem a aproximadamente 0,65% dos nêutrons produzidos pela fissão do Urânio-235. Parece pouco, porém para escalas de tempo maiores quando comparadas com a escala de tempo da fissão, estes nêutrons têm um efeito muito significativo.

Isto posto, o próximo passo é definir um conjunto de equações que descrevam a dependência temporal da concentração dos precursores de nêutrons atrasados. Para isso, inicialmente vamos avaliar quais os mecanismos de perda e ganho dos precursores, possibilitando assim a construção de uma equação de balanço.

Sabemos que a variação temporal da concentração dos precursores é dada pela produção do precursor através da fissão, e pela perda causada pelo posterior decaimento.

Os nêutrons produzidos pelo grupo i podem ser contabilizados da seguinte forma: multiplicando a taxa de produção de nêutrons por fissão ($\nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t)$) pela fração de nêutrons atrasados (β_i):

$$\beta_i \nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t). \quad (2.24)$$

Já a perda é dada pela taxa de decaimento do precursor, que pode ser expressa como o produto da concentração do precursor ($C_i(\mathbf{r}, t)$) e da sua respectiva constante de decaimento (λ_i). A constante de decaimento de um precursor é a fração do número inicial de átomos do precursor que decai em determinada unidade de tempo.

Assim, a equação de balanço que representa a variação temporal da concentração de precursores é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(\mathbf{r}, t) = -\lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) \quad i = 1, \dots, 6. \quad (2.25)$$

Logo, incluindo os nêutrons atrasados na equação (2.21) através do fator β e da taxa de decaimento e assumindo que as seções de choque também podem variar com o tempo, temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) \\ &\quad - \Sigma_{rg}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{s, g'g}(\mathbf{r}, t) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'=1}^G [\nu \Sigma_f(\mathbf{r}, t)]_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \chi_g^d \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(\mathbf{r}, t) = -\lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \sum_{g'=1}^G [\nu \Sigma_f(\mathbf{r}, t)]_{g'} \phi_{g'}(\mathbf{r}, t), \quad (2.27)$$

para $g = 1, 2, \dots, G$ e $i = 1, 2, \dots, I$ e onde:

- \mathbf{r} é o vetor posição espacial,
- t é a variável temporal,
- v é a velocidade dos nêutrons,
- D é o coeficiente de difusão,
- Σ_r é a seção de choque macroscópica de remoção,
- Σ_s é a seção de choque macroscópica de espalhamento,
- Σ_f é a seção de choque macroscópica de fissão,

- χ^p é o espectro de fissão para os nêutrons prontos,
- χ^d é o espectro de fissão para os nêutrons atrasados,
- ν é o número médio de nêutrons emitidos na fissão,
- ϕ representa o fluxo escalar de nêutrons,
- ∇ é o gradiente,
- C é a concentração do precursor,
- λ_i é a constante de decaimento do precursor,
- β é a fração de nêutrons atrasados.

O sub-índice g indica o grupo de energia e o sub-índice i indica o grupo do precursor.

Na equação (2.26) o termo que aparece à esquerda da igualdade representa a variação temporal do fluxo de nêutrons. Os termos que aparecem à direita representam respectivamente: as fugas (termo difusivo), as perdas por remoção, o espalhamento para o grupo g , a produção de nêutrons prontos por fissão e a produção de nêutrons atrasados pelo decaimento dos precursores. Na equação (2.27) o termo à esquerda representa a variação temporal da concentração de precursores, enquanto que os termos à direita representam respectivamente a taxa de decaimento do precursor e a sua produção através da fissão.

O sistema de equações formado pelas equações (2.26) e (2.27) descreve o fluxo escalar de nêutrons em um reator nuclear incluindo os nêutrons atrasados e a sua solução será discutida na seção 3.2.

3. METODOLOGIA DE SOLUÇÃO VIA SÉRIE DE TAYLOR

Neste capítulo são apresentados os métodos de solução utilizados nesse trabalho. Primeiramente, na seção 3.1, é mostrada a solução da equação de difusão para o caso estacionário, bem como o cálculo do coeficiente de multiplicação efetivo utilizando o método das potências. Em seguida, na seção 3.2, é apresentada a solução para a equação cinética de difusão incluindo os nêutrons atrasados para um transiente genérico.

3.1 Solução da equação de difusão estacionária

A equação de difusão estacionária para o modelo de multigrupos de energia é dada por:

$$-\nabla \cdot D_g(\mathbf{r})\nabla\phi_g(\mathbf{r}) + \Sigma_{rg}(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g' \neq g} \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r})\phi_{g'}(\mathbf{r}) + \frac{1}{k}\chi_g \sum_{g'} \nu_{g'}\Sigma_{fg'}(\mathbf{r})\phi_{g'}(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

onde $g = 1, 2, \dots, G$. Na equação (3.1), $D_g(\mathbf{r})$ é o coeficiente de difusão para o grupo de energia g , $\Sigma_{rg}(\mathbf{r})$ é a seção de choque de remoção do grupo de energia g , $\Sigma_{sgg'}(\mathbf{r})$ é a seção de choque de espalhamento do grupo de energia g' para o grupo de energia g , k é o fator de multiplicação efetivo, χ_g é o espectro integrado de fissão para o grupo de energia g , ν_g é o número médio de nêutrons no grupo g emitidos por fissão, $\Sigma_{fg}(\mathbf{r})$ é a seção de choque de fissão para o grupo de energia g e $\phi_g(\mathbf{r})$ é o fluxo escalar de nêutrons para o grupo de energia g .

A equação (3.1) pode ser escrita na forma matricial, aqui, por conveniência introduz-se a seguinte notação: $\mathbf{M} = (m_{gg'})$ e $\mathbf{F} = (f_{gg'})$, logo:

$$\mathbf{M}\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{k}\mathbf{F}\psi(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

onde,

$$\begin{aligned}
m_{gg'} &= \begin{cases} -\nabla \cdot D_g(\mathbf{r})\nabla + \Sigma_{rg}(\mathbf{r}), & g = g', \\ -\Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}), & g \neq g', \end{cases} \\
f_{gg'} &= \chi_g \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}), \\
\psi(\mathbf{r}) &= \left(\phi_1(\mathbf{r}) \quad \phi_2(\mathbf{r}) \quad \cdots \quad \phi_G(\mathbf{r}) \right)^T.
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Com o objetivo de resolver o problema de autovalor dado pela equação (3.2) utiliza-se o método da potência que será descrito na próxima seção.

3.1.1 O Método da Potência

O método da potência [Duderstadt e Hamilton, 1976] é um método iterativo que avalia o fluxo escalar de nêutrons e o fator de multiplicação efetivo até a convergência de acordo com um critério estabelecido. O método da potência utilizado nesse trabalho é dado por:

$$\mathbf{M}\psi^{(n)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{k^{(n-1)}} \mathbf{F}\psi^{(n-1)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{k^{(n-1)}} \mathbf{S}^{(n-1)}(\mathbf{r}), \tag{3.4}$$

cujas soluções dominantes são o fluxo escalar de nêutrons atualizado. A solução do problema (3.4) é discutida na seção 3.1.2.

A fim de calcular o fator de multiplicação efetivo utiliza-se a seguinte expressão:

$$k^{(n)} = \frac{\int \mathbf{S}^{(n)} dV}{\frac{1}{k^{(n-1)}} \int \mathbf{S}^{(n-1)} dV}, \tag{3.5}$$

onde V é o volume definido pelas fronteiras de \mathbf{r} e $n = 1, 2, \dots, N$ é o número de iterações. No presente trabalho, o critério utilizado como limitação para as iterações é o critério de diferença relativa, que para o autovalor k é dado por:

$$\left| \frac{k^{(N-1)} - k^{(N)}}{k^{(N)}} \right| < \epsilon_k, \tag{3.6}$$

e para o fluxo escalar, é dado por:

$$\left| \frac{\phi^{(N-1)} - \phi^{(N)}}{\phi^{(N)}} \right| < \epsilon_\phi. \quad (3.7)$$

Cabe observar que para dar início ao processo iterativo necessita-se da escolha de uma estimativa inicial para o fluxo escalar e para o fator de multiplicação efetivo, dado este valor inicial, o método irá convergir para a solução do problema, de forma iterativa de acordo com os critérios previamente escolhidos para ϵ_k e ϵ_ϕ .

Através das equações (3.4) e (3.5), nós encontramos a forma do fluxo escalar de nêutrons e um valor para o fator de multiplicação efetivo k . Em vista de obter a amplitude do fluxo precisa-se de uma nova informação. Neste trabalho, utilizamos a potência gerada prescrita P e a potência calculada,

$$\hat{P} = E \int \sum_{g=1}^G \Sigma_{fg}(\mathbf{r}) \phi_g^{(N)}(\mathbf{r}) dV, \quad (3.8)$$

onde E é a de energia média gerada por fissão.

Quando o método da potência converge, o fluxo de nêutrons é dado pela função $\psi^{(N)}(\mathbf{r})$ convergida e pela potência gerada:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi^{(N)}(\mathbf{r}) \frac{P}{\hat{P}}, \quad (3.9)$$

e a aproximação para o fator de multiplicação efetivo é dada por $k^{(N)}$.

3.1.2 A Expansão em Série de Taylor

Sem perda da generalidade, considera-se a equação de difusão estacionária em geometria cartesiana para dois grupos de energia ($G = 2$) e sem *up-scattering* ($\Sigma_{s21} = 0$), ou seja, os nêutrons não ganham energia ao sofrerem espalhamento, o que é uma consideração adequada quando se trata de problemas em reatores nucleares térmicos. Como de costume, os grupos um e dois são chamados de rápido e térmico, respectivamente. Também considera-se que a geração de nêutrons, devido ao processo de fissão, ocorre somente no grupo rápido, ou seja, $\chi_1 = 1$ e $\chi_2 = 0$. Neste trabalho considera-se um caso heterogêneo no qual em

cada região os parâmetros são constantes mas não necessariamente iguais. Devido a estas hipóteses pode-se simplificar a equação (3.1) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} -D_1^{[r]} \frac{d^2}{dx^2} \phi_1^{[r]}(x) + \Sigma_{r1}^{[r]} \phi_1^{[r]}(x) &= \frac{1}{k} \left(\nu_1 \Sigma_{f1}^{[r]} \phi_1^{[r]}(x) + \nu_2 \Sigma_{f2}^{[r]} \phi_2^{[i]}(x) \right), \\ -D_2^{[r]} \frac{d^2}{dx^2} \phi_2^{[r]}(x) + \Sigma_{r2}^{[r]} \phi_2^{[r]}(x) - \Sigma_{s12}^{[r]} \phi_1^{[r]}(x) &= 0, \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde $r = 1, 2, \dots, R$ denota a respectiva região e R é o número de regiões. A validade da equação (3.10) é restrita aos valores de x entre as interfaces da região r , representadas pelas posições das interfaces em $x^{[r-1]}$ e $x^{[r]}$. Para conectar as soluções das equações (3.10) utilizam-se as condições de contorno e de interface. Como condição de contorno considera-se os fluxo igual a zero nos contornos e como condição de interface utiliza-se a continuidade do fluxo e da corrente de nêutrons, através da convencional Lei de Fick [Duderstadt e Hamilton, 1976]:

$$\begin{aligned} \phi_g^{[1]}(x^{[0]}) &= 0, \\ \phi_g^{[r]}(x^{[r]}) &= \phi_g^{[r+1]}(x^{[r]}), \\ -D_g^{[r]} \frac{d}{dx} \phi_g^{[r]}(x) \Big|_{x=x^{[r]}} &= -D_g^{[r+1]} \frac{d}{dx} \phi_g^{[r+1]}(x) \Big|_{x=x^{[r]}}, \\ \phi_g^{[R]}(x^{[R]}) &= 0, \end{aligned} \quad (3.11)$$

para $r = 1, 2, \dots, R-1$ e $g = 1, 2$. Neste trabalho a distância extrapolada não é explicitada já que ela pode ser considerada pequena quando comparada à dimensão do domínio.

A equação (3.10) pode ser resolvida utilizando uma série de Taylor para ϕ_g^r . Com esse objetivo, aproxima-se a solução exata por um polinômio, onde em um determinado ponto arbitrário do sub-domínio a expressão coincide com a solução exata, desde que a função seja analítica naquele ponto. Divide-se o domínio em células de tamanho Δx , logo a expansão em série de Taylor para o fluxo de nêutrons para uma célula genérica ℓ é

$$\phi_g^{[\ell]}(x) = \sum_{j=0}^{\infty} A_{gj}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j, \quad (3.12)$$

onde os coeficientes $A_{gj}^{[\ell]}$ devem ser determinados, $\ell = 1, 2, \dots, L$ denota a respectiva célula e L é o número total de células. De acordo com o método da potência (3.4) os termos que multiplicam $1/k$ são considerados como termos-fonte $S^{[\ell]}(x)$, sem influência direta nos procedimentos seguintes. Dessa forma, o termo-fonte pode ser representado também por uma expansão em série de Taylor e a equação (3.10) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
& -D_1^{[\ell]} \frac{d^2}{dx^2} \sum_{j=0}^{\infty} A_{1j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j + \Sigma_{r1}^{[\ell]} \sum_{j=0}^{\infty} A_{1j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j = \frac{1}{k} S^{[\ell]}(x), \\
& -D_2^{[\ell]} \frac{d^2}{dx^2} \sum_{j=0}^{\infty} A_{2j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j + \Sigma_{r2}^{[\ell]} \sum_{j=0}^{\infty} A_{2j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j \\
& \quad - \Sigma_{s12}^{[\ell]} \sum_{j=0}^{\infty} A_{1j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j = 0,
\end{aligned} \tag{3.13}$$

onde

$$\begin{aligned}
S^{[\ell]}(x) &= \nu_1 \Sigma_{f1}^{[\ell]} \sum_{j=0}^{\infty} A_{1j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j + \nu_2 \Sigma_{f2}^{[\ell]} \sum_{j=0}^{\infty} A_{2j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j \\
&= \sum_{j=0}^{\infty} s_j^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j,
\end{aligned} \tag{3.14}$$

e $x_c^{[\ell]}$ é o centro da célula ℓ , onde a série de Taylor é centrada. De forma similar, a validade da equação (3.12) e da equação (3.13) é restrita aos valores de x entre as interfaces da célula ℓ . Para resolver a equação (3.13) avaliam-se as derivadas de segunda ordem e organizam-se os termos de acordo com a potência do termo $(x - x_c^{[\ell]})$:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=0}^{\infty} \left(-D_1^{[\ell]} A_{1(j+2)}^{[\ell]} (j+2)(j+1) (x - x_c^{[\ell]})^j + \Sigma_{r1}^{[\ell]} A_{1j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j \right. \\
& \quad \left. - \frac{1}{k} s_j^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j \right) = 0, \\
& \sum_{j=0}^{\infty} \left(-D_2^{[\ell]} A_{2(j+2)}^{[\ell]} (j+2)(j+1) (x - x_c^{[\ell]})^j + \Sigma_{r2}^{[\ell]} A_{2j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j \right. \\
& \quad \left. - \Sigma_{s12}^{[\ell]} A_{1j}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]})^j \right) = 0.
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Analisando cada termo do polinômio separadamente, pode-se construir um esquema

recursivo para determinar os coeficientes $A_{gj}^{[\ell]}$ para $j \geq 2$:

$$\begin{aligned} A_{1(j+2)}^{[\ell]} &= \frac{-\frac{1}{k}s_j^{[\ell]} + \Sigma_{r1}^{[\ell]}A_{1j}^{[\ell]}}{D_1^{[\ell]}(j+2)(j+1)}, \\ A_{2(j+2)}^{[\ell]} &= \frac{\Sigma_{r2}^{[\ell]}A_{2j}^{[\ell]} - \Sigma_{s12}^{[\ell]}A_{1j}^{[\ell]}}{D_2^{[\ell]}(j+2)(j+1)}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

para $j = 0, 1, \dots$

Para conectar as soluções da equação (3.13) e posteriormente calcular os coeficientes $A_{gj}^{[\ell]}$, usam-se as condições de contorno e interface dadas por (3.11). Então, utilizando a expansão (3.12), as condições de contorno e interface podem ser escritas como:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} A_{gj}^{[1]}(x^{[0]} - x_c^{[1]})^j &= 0, \\ \sum_{j=0}^{\infty} A_{gj}^{[\ell]}(x^{[\ell]} - x_c^{[\ell]})^j &= \sum_{j=0}^{\infty} A_{gj}^{[\ell+1]}(x^{[\ell]} - x_c^{[\ell+1]})^j, \\ -D_g^{[\ell]} \sum_{j=0}^{\infty} A_{g(j+1)}^{[\ell]}(j+1)(x^{[\ell]} - x_c^{[\ell]})^j &= \\ -D_g^{[\ell+1]} \sum_{j=0}^{\infty} A_{g(j+1)}^{[\ell+1]}(j+1)(x^{[\ell]} - x_c^{[\ell+1]})^j, \\ \sum_{j=0}^{\infty} A_{gj}^{[L]}(x^{[L]} - x_c^{[L]})^j &= 0. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Para avaliar os coeficientes através das equações (3.16) e (3.17), é construído um sistema linear cuja ordem depende da ordem de truncamento da série (3.12). Neste trabalho, é utilizada uma ordem de truncamento dada por:

$$A_{gJ}^{[\ell]}(x - x_c^{[\ell]})^J < \varepsilon, \quad (3.18)$$

para qualquer $x \in [x^{[\ell-1]}, x^{[\ell]}]$ e para qualquer ℓ . Esse critério assegura que o valor absoluto do fluxo de nêutrons não mude significativamente ao incluir termos de mais alta ordem da série (3.12). Resultados numéricos para diversos casos (Tabela 4.2), mostram que para $\Delta x = 1.0 \text{ cm}$, a série satisfaz o critério requerido, para este problema específico, com apenas

três termos ($J = 2$). Então, utilizando as expressões (3.16) e truncando a série de Taylor (3.12) no terceiro termo, obtêm-se as seguintes equações:

$$\begin{aligned}
\phi_1^{[\ell]}(x) &= A_{10}^{[\ell]} \left(1 + \frac{(x - x_c^{[\ell]})^2 \Sigma_{r1}^{[\ell]}}{2D_1^{[\ell]}} \right) + A_{11}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]}) \\
&\quad - \frac{(x - x_c^{[\ell]})^2 s_0^{[\ell]}}{2kD_1^{[\ell]}}, \\
\phi_2^{[\ell]}(x) &= A_{20}^{[\ell]} \left(1 + \frac{(x - x_c^{[\ell]})^2 \Sigma_{r2}^{[\ell]}}{2D_2^{[\ell]}} \right) + A_{21}^{[\ell]} (x - x_c^{[\ell]}) \\
&\quad - \frac{(x - x_c^{[\ell]})^2 \Sigma_{s12}^{[\ell]} A_{10}^{[\ell]}}{2D_2^{[\ell]}}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Utilizando estas expressões (3.19) para $\phi_1^{[\ell]}(x)$ e $\phi_2^{[\ell]}(x)$, juntamente com as condições de contorno e interface, podem-se construir dois sistemas lineares algébricos pentadiagonais desacoplados (o primeiro para $\phi_1(x)$ e o segundo para $\phi_2(x)$). A solução do primeiro sistema pode ser calculada de forma independente e então pode ser utilizada como parâmetro conhecido no segundo sistema. Dessa forma, ao invés de utilizar um sistema para o cálculo de todos $A_{gj}^{[\ell]}$, os coeficientes são calculados em duas etapas diferentes. O sistema linear é escrito como:

$$\mathbf{C}_g \mathbf{A}_g = \mathbf{B}_g, \tag{3.20}$$

para $g = 1, 2$, onde

$$\mathbf{C}_g = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_g^{[1]} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{i}_g^{[1]} & \mathbf{i}_g^{[1]+} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{i}_g^{[2]} & \mathbf{i}_g^{[2]+} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{i}_g^{[L-1]} & \mathbf{i}_g^{[L-1]+} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{b}_g^{[L]} \end{pmatrix}, \tag{3.21}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_g &= (A_{g0}^{[1]} \ A_{g1}^{[1]} \ A_{g0}^{[2]} \ \dots \ A_{g0}^{[L]} \ A_{g1}^{[L]})^T, \\
\mathbf{B}_g &= (\mathbf{sb}_g^{[1]} \ \mathbf{si}_g^{[1]} \ \mathbf{si}_g^{[2]} \ \dots \ \mathbf{si}_g^{[L-1]} \ \mathbf{sb}_g^{[L]})^T,
\end{aligned} \tag{3.22}$$

com sub-matrizes $\mathbf{b}_g^{[1]}$, $\mathbf{b}_g^{[L]}$, $\mathbf{i}_g^{[\ell_i]}$, $\mathbf{i}_g^{[\ell_i]+}$, $\mathbf{sb}_g^{[1]}$, $\mathbf{sb}_g^{[L]}$ e $\mathbf{si}_g^{[\ell_i]}$ para $g = 1, 2$ e $\ell_i = 1, 2, \dots, L-1$ definidas abaixo:

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}_g^{[1]} &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{(x^{[0]} - x_c^{[1]})^2 \Sigma_{rg}^{[1]}}{2D_g^{[1]}} & x^{[0]} - x_c^{[1]} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{b}_g^{[L]} &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{(x^{[L]} - x_c^{[L]})^2 \Sigma_{rg}^{[L]}}{2D_g^{[L]}} & x^{[L]} - x_c^{[L]} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{i}_g^{[\ell_i]} &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i]})^2 \Sigma_{rg}^{[\ell_i]}}{2D_g^{[\ell_i]}} & x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i]} \\ (x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i]}) \Sigma_{rg}^{[\ell_i]} & D_g^{[\ell_i]} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{i}_g^{[\ell_i]+} &= \begin{pmatrix} -1 - \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i+1]})^2 \Sigma_{rg}^{[\ell_i+1]}}{2D_g^{[\ell_i+1]}} & -x^{[\ell_i]} + x_c^{[\ell_i+1]} \\ -(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i+1]}) \Sigma_{rg}^{[\ell_i+1]} & -D_g^{[\ell_i+1]} \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{sb}_1^{[1]} &= \begin{pmatrix} \frac{(x^{[0]} - x_c^{[1]})^2 s_0^{[1]}}{2kD_1^{[1]}} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{sb}_1^{[L]} &= \begin{pmatrix} \frac{(x^{[L]} - x_c^{[L]})^2 s_0^{[L]}}{2kD_1^{[L]}} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{sb}_2^{[1]} &= \begin{pmatrix} \frac{(x^{[0]} - x_c^{[1]})^2 \Sigma_{s12}^{[1]} A_{10}^{[1]}}{2D_2^{[1]}} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{sb}_2^{[L]} &= \begin{pmatrix} \frac{(x^{[L]} - x_c^{[L]})^2 \Sigma_{s12}^{[L]} A_{10}^{[L]}}{2D_2^{[L]}} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{si}_1^{[\ell_i]} &= \begin{pmatrix} \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i]})^2 s_0^{[\ell_i]}}{2kD_1^{[\ell_i]}} - \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i+1]})^2 s_0^{[\ell_i+1]}}{2kD_1^{[\ell_i+1]}} \\ \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i]}) s_0^{[\ell_i]}}{k} - \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i+1]}) s_0^{[\ell_i+1]}}{k} \end{pmatrix}, \\
\mathbf{si}_2^{[\ell_i]} &= \begin{pmatrix} \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i]})^2 \Sigma_{s12}^{[\ell_i]} A_{10}^{[\ell_i]}}{2D_2^{[\ell_i]}} - \frac{(x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i+1]})^2 \Sigma_{s12}^{[\ell_i+1]} A_{10}^{[\ell_i+1]}}{2D_2^{[\ell_i+1]}} \\ (x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i]}) \Sigma_{s12}^{[\ell_i]} A_{10}^{[\ell_i]} - (x^{[\ell_i]} - x_c^{[\ell_i+1]}) \Sigma_{s12}^{[\ell_i+1]} A_{10}^{[\ell_i+1]} \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.24}$$

e são os equivalentes aos termos dos coeficientes nos contornos $x = x^{[0]}$, $x = x^{[L]}$, nas interfaces em $x = x^{[\ell_i]}$, e os termos independentes nos contornos em $x = x^{[0]}$, em $x = x^{[L]}$ e nas interfaces em $x = x^{[\ell_i]}$ para os grupos de energia 1 e 2, respectivamente; e $\mathbf{0}$ denota

a matriz nula. A ordem do sistema é $2L$ para o caso em que $J = 2$, e de forma genérica a ordem é $J \times L$ para ambos os grupos de energia. A solução do sistema (3.20) utilizando o método da potência apresentado na seção 3.1.1, fornece toda informação necessária para avaliar o fluxo escalar de nêutrons em qualquer ponto do domínio com erro controlado. Cabe salientar que essa metodologia é quase tão simples quanto um algoritmo de diferenças finitas, porém com a vantagem de fornecer uma solução contínua com controle de erro ao invés de uma solução discreta que geralmente necessita de interpolação, e além disso requer tanto esforço computacional quanto o presente método.

3.1.3 Análise da Convergência

A convergência de (3.12) é assegurada pelo simples fato de que um polinômio é diferenciável em qualquer ponto arbitrário do intervalo e é limitado nesse intervalo, o que nos permite utilizar o critério de Lipschitz [Searcoid, 2007]. Esse critério indica se uma função é contínua com a medida da diferença da solução exata e da solução aproximada, da seguinte forma:

$$|\phi(x_i) - \phi(x_j)| \leq \kappa |x_i - x_j|. \quad (3.25)$$

Se essa desigualdade é satisfeita em um determinado intervalo de x , então a função $\phi(x)$ é chamada de “Lipschitz contínua”. Funções Lipschitz contínuas são uniformemente contínuas, o que significa que para qualquer $\hat{\epsilon} > 0$ existe $\delta > 0$ tal que se $|x - x_i| < \delta$ então $|\phi(x) - \phi(x_i)| < \hat{\epsilon}$. Em nosso trabalho, utilizando a expansão (3.12), esse critério assegura a convergência da série para $\delta = \hat{\epsilon}/\kappa$:

$$|\phi_g(x) - \phi_g(x_0)| \leq \kappa |x - x_0| < \kappa\delta = \hat{\epsilon}, \quad (3.26)$$

com x e x_0 sendo quaisquer pontos do domínio, essa desigualdade é satisfeita para a série completa para x entre os contornos do domínio.

Para melhor compreensão de como esse critério pode ser usado para uma análise de convergência e estimativa de erro, supõe-se uma expansão em Série de Taylor de uma função

genérica $f(x)$:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(x - x_0)^n, \quad (3.27)$$

sendo a_n os coeficientes da expansão e x_0 o ponto do domínio onde a série é centrada. Escrevendo os termos do somatório de forma explícita, tem-se:

$$f(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)^2 + a_3(x - x_0)^3 + \dots \quad (3.28)$$

Agora, avaliando a função $f(x)$ no ponto x_0 , obtém-se:

$$f(x) = a_0. \quad (3.29)$$

Portanto, a representação em Série de Taylor de uma função $f(x)$ apresenta um valor exato em determinado ponto do domínio, independente da ordem de truncamento utilizada para a série. Sendo assim, podemos afirmar que como a solução exata coincide com um ponto x no sub-domínio, desse modo para uma escolha adequada de κ a solução exata é limitada superiormente e inferiormente pelo cone com abertura κ e assim pode ser usada como estimativa de erro.

A expansão em Série de Taylor vai diferir da solução exata na medida que o ponto a ser avaliado se distancia do ponto x_0 , onde a série é centrada. Ou seja, existe uma relação entre o cone de Lipschitz e o erro associado à função em determinado ponto. Sabendo que o cone de Lipschitz inclui toda a função em seu interior, se o cone for centrado em x_0 , onde a solução é exata, o valor da função exata vai estar sempre dentro do cone e, além disso, conforme o Δx (tamanho do sub-domínio) se aproxima de zero, o cone vai diminuindo sua abertura. Logo, o que se faz é reduzir a abertura κ do cone por meio da diminuição do Δx . Portanto, para avaliar o erro que está sendo cometido, basta verificar a amplitude máxima que o cone de Lipschitz atinge avaliado em $\phi(x)$ e $\phi(x_0)$, e essa diferença máxima pode ser associada, dessa forma, ao máximo erro que está sendo cometido com a expansão.

Note que esse procedimento somente faz sentido quando a solução é dada por uma

função contínua. Em outras palavras, um critério de convergência baseado no critério de Lipschitz não é aplicável para soluções discretas, já que esse tipo de solução não fornece uma função contínua como solução. Valores para κ calculados através da equação (3.26), para determinados problemas específicos, serão apresentados no capítulo 4.

3.2 Solução da equação cinética de difusão

Nesta seção considera-se a equação cinética de difusão de nêutrons unidimensional em geometria cartesiana considerando dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. Considera-se também que tanto os nêutrons prontos quanto os atrasados são gerados no grupo rápido de energia, ou seja, $\chi_1^p = \chi_1^d = 1$ e $\chi_2^p = \chi_2^d = 0$. Como exemplo, escolhe-se deixar de forma explícita a dependência temporal da seção de choque de remoção do grupo térmico Σ_{r2} , já que na maioria dos casos considerados neste trabalho o transiente é considerado nesse parâmetro, porém o método pode ser utilizado para transientes aplicados em qualquer um dos parâmetros nucleares. Com essas considerações, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_1^{[r]}} \frac{\partial}{\partial t} \phi_1^{[r]}(x, t) &= D_1^{[r]} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1^{[r]}(x, t) - \Sigma_{r1}^{[r]} \phi_1^{[r]}(x, t) + \frac{1}{k} (1 - \beta) (\nu_1 \Sigma_{f1}^{[r]} \phi_1^{[r]}(x, t) \\ &\quad + \nu_2 \Sigma_{f2}^{[r]} \phi_2^{[r]}(x, t)) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i^{[r]}(x, t), \\ \frac{1}{v_2^{[r]}} \frac{\partial}{\partial t} \phi_2^{[r]}(x, t) &= D_2^{[r]} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2^{[r]}(x, t) - \Sigma_{r2}^{[r]}(t) \phi_2^{[r]}(x, t) + \Sigma_{s12}^{[r]} \phi_1^{[r]}(x, t), \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i^{[r]}(x, t) = \frac{\beta_i}{k} \left(\Sigma_{f1}^{[r]} \phi_1^{[r]}(x, t) + \Sigma_{f2}^{[r]} \phi_2^{[r]}(x, t) \right) - \lambda_i C_i^{[r]}(x, t), \quad (3.31)$$

onde $i = 1, \dots, 6$ e $r = 1, 2, \dots, R$ denota a respectiva região e R é o número de regiões. A validade das equações (3.30) e (3.31) é restrita aos valores de x entre as interfaces da região r , representadas pelas posições das interfaces em $x^{[r-1]}$ e $x^{[r]}$. Para conectar as soluções das equações (3.30) e (3.31) utilizam-se as condições de contorno (fluxo igual a zero nos contornos) e interface (continuidade da corrente e do fluxo de nêutrons nas interfaces).

Como no caso estacionário, o sistema de equações dado por (3.30) e (3.31) pode ser resolvido utilizando uma série de Taylor para $\phi_1^{[r]}$, $\phi_2^{[r]}$ e $C_i^{[r]}$. Neste caso, o domínio espacial

é dividido em células de tamanho Δx e o domínio temporal também é dividido em intervalos τ de tamanho Δt . Então, expandem-se os fluxos escalares de nêutrons e as concentrações de precursores em séries de Taylor descritas abaixo para uma célula genérica ℓ e para um intervalo de tempo τ :

$$\begin{aligned}\phi_1^{[\ell,\tau]}(x,t) &= \sum_{n=0}^2 \sum_{m=0}^1 A_{n,m_1}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n (t - t_c^{[\tau]})^m, \\ \phi_2^{[\ell,\tau]}(x,t) &= \sum_{n=0}^2 \sum_{m=0}^1 A_{n,m_2}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n (t - t_c^{[\tau]})^m, \\ C_i^{[\ell,\tau]}(x,t) &= \sum_{n=0}^2 \sum_{m=0}^1 A_{n,m_{i+2}}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n (t - t_c^{[\tau]})^m.\end{aligned}\quad (3.32)$$

Aqui $x_c^{[\ell]}$ é o centro da célula ℓ , onde a série em x é centrada e $t_c^{[\tau]}$ é o centro do intervalo τ onde a série em t é centrada. Observa-se que as séries já estão truncadas, sendo o truncamento baseado nos mesmos critérios utilizados na solução do problema estacionário.

Sabe-se que, para uma determinada função arbitrária $f(x,t)$ expandida em série de Taylor, tem-se:

$$\begin{aligned}f(x,t) &= \sum_{n=0}^2 \sum_{m=0}^1 A_{n,m} (x - x_c)^n (t - t_c)^m, \\ \frac{\partial}{\partial t} f(x,t) &= \sum_{n=0}^2 A_{n,1} (x - x_c)^n, \\ \frac{\partial}{\partial x} f(x,t) &= \sum_{n=0}^1 \sum_{m=0}^1 (n+1) A_{n+1,m} (x - x_c)^n (t - t_c)^m, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} f(x,t) &= 2 \sum_{m=0}^1 A_{2,m} (t - t_c)^m.\end{aligned}\quad (3.33)$$

Neste ponto define-se a condição inicial:

$$\begin{aligned}\phi_1^{[\ell,\tau]}(x,0) &= B_{2_1} (x - x_c^{[\ell]})^2 + B_{1_1} (x - x_c^{[\ell]}) + B_{0_1}, \\ \phi_2^{[\ell,\tau]}(x,0) &= B_{2_2} (x - x_c^{[\ell]})^2 + B_{1_2} (x - x_c^{[\ell]}) + B_{0_2},\end{aligned}\quad (3.34)$$

$$\begin{aligned}
C_i^{[\ell,\tau]}(x, 0) &= \frac{\beta_i}{k\lambda_i} \left(\Sigma_{f1}\phi_1^{[\ell,\tau]}(x, 0) + \Sigma_{f2}\phi_2^{[\ell,\tau]}(x, 0) \right), \\
&= B_{2_{i+2}}(x - x_c^{[\ell]})^2 + B_{1_{i+2}}(x - x_c^{[\ell]}) + B_{0_{i+2}}.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Lembrando que utiliza-se como condição inicial a solução do problema estacionário de difusão resolvido na seção 3.1. Portanto, as constantes B_{n_j} presentes nas equações (3.34) já estão determinadas.

Substituindo a série de Taylor (3.32) para uma determinada incógnita j , sendo $j = 1, \dots, (I + G)$, nesse caso $j = 1, \dots, 8$, obtém-se:

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^2 \sum_{m=0}^1 A_{n,m_j}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n (-\Delta t)^m &= B_{2_j}(x - x_c^{[\ell]})^2 + B_{1_j}(x - x_c^{[\ell]}) + B_{0_j}, \\
A_{2,0_j}^{[\ell,\tau]} + A_{2,1_j}^{[\ell,\tau]}(-\Delta t) &= B_{2_j}.
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Isolando $A_{2,1_j}^{[\ell,\tau]}$ na equação (3.36), tem-se:

$$A_{2,1_j}^{[\ell,\tau]} = \frac{A_{2,0_j}^{[\ell,\tau]} - B_{2_j}}{\Delta t}, \tag{3.37}$$

de forma similar,

$$\begin{aligned}
A_{1,1_j}^{[\ell,\tau]} &= \frac{A_{1,0_j}^{[\ell,\tau]} - B_{1_j}}{\Delta t}, \\
A_{0,1_j}^{[\ell,\tau]} &= \frac{A_{0,0_j}^{[\ell,\tau]} - B_{0_j}}{\Delta t},
\end{aligned} \tag{3.38}$$

ou, de maneira geral:

$$A_{n,1_j}^{[\ell,\tau]} = \frac{A_{n,0_j}^{[\ell,\tau]} - B_{n_j}}{\Delta t}. \tag{3.39}$$

Então, utilizando (3.39) na equação (3.31) para os precursores, obtém-se:

$$\sum_{n=0}^2 A_{n,1_{i+1}}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n = \frac{\beta_i}{k} \left(\nu_1 \Sigma_{f1} \sum_{n=0}^2 A_{n,0_j}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n + \nu_2 \Sigma_{f2} \sum_{n=0}^2 A_{n,0_2}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n \right) - \lambda_i \sum_{n=0}^2 A_{n,0_{i+2}}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n, \quad (3.40)$$

logo,

$$\frac{A_{0,0_{i+2}}^{[\ell,\tau]} - B_{0_{i+2}}}{\Delta t} = \frac{\beta_i}{k} \left(\nu_1 \Sigma_{f1} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + \nu_2 \Sigma_{f2} A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} \right) - \lambda_i A_{0,0_{i+2}}^{[\ell,\tau]}, \quad (3.41)$$

portanto,

$$\begin{aligned} A_{0,0_{i+2}}^{[\ell,\tau]} &= \frac{\Delta t}{1 + \Delta t \lambda_i} \left[\frac{\beta_i}{k} \left(\nu_1 \Sigma_{f1} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + \nu_2 \Sigma_{f2} A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} \right) + \frac{B_{0_{i+2}}}{\Delta t} \right], \\ &= \frac{\Delta t \beta_i \nu_1 \Sigma_{f1}}{(1 + \Delta t \lambda_i) k} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + \frac{\Delta t \beta_i \nu_2 \Sigma_{f2}}{(1 + \Delta t \lambda_i) k} A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + \frac{1}{(1 + \Delta t \lambda_i)} B_{0_{i+2}}, \\ &= M_{1_{i+2}} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + M_{2_{i+2}} A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + M_{ci_{i+2}} B_{0_{i+2}}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Com isso, substitui-se na primeira equação de (3.30), para o grupo 1 de energia, e, dessa forma, retira-se a dependência explícita dos precursores de nêutrons atrasados:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_1} \frac{A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} - B_{0_1}}{\Delta t} &= \frac{(1 - \beta)}{k} \left(\nu_1 \Sigma_{f1} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + \nu_2 \Sigma_{f2} A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} \right) + 2D_1 A_{2,0_1} - \Sigma_{r1} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} \\ &\quad + \sum_{i=1}^6 \lambda_i (M_{1_{i+2}} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + M_{2_{i+2}} A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + M_{ci_{i+2}} B_{0_{i+2}}), \end{aligned} \quad (3.43)$$

agora, isolando $A_{2,0_1}^{[\ell,\tau]}$ na equação (3.43) obtém-se:

$$\begin{aligned} A_{2,0_1}^{[\ell,\tau]} &= \frac{1}{2D_1} \left(\Sigma_{r1} - \frac{1}{v_1 \Delta t} - \frac{\nu_1 (1 - \beta) \Sigma_{f1}}{k} - \sum_i \lambda_i M_{1_{i+2}} \right) A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} \\ &\quad + \frac{1}{2D_1} \left(-\frac{\nu_2 (1 - \beta) \Sigma_{f2}}{k} - \sum_i \lambda_i M_{2_{i+2}} \right) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} \\ &\quad + \frac{1}{2D_1} \left[-\frac{B_{0_1}}{v_1 \Delta t} - \sum_i \lambda_i M_{ci_{i+2}} B_{0_{i+2}} \right], \end{aligned} \quad (3.44)$$

ou seja,

$$A_{2,0_1}^{[\ell,\tau]} = Q_{1_1} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_1} A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_1}, \quad (3.45)$$

para o grupo 1 de energia.

A segunda equação de (3.30), para o grupo 2 de energia, é descrita da seguinte forma:

$$\frac{1}{v_2} \frac{A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} - B_{0_2}}{\Delta t} = \Sigma_{1_2} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + 2D_2 A_{2,0_2}^{[\ell,\tau]} - \Sigma_{r_2}(t) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]}. \quad (3.46)$$

Isolando $A_{2,0_2}^{[\ell,\tau]}$ na equação (3.46) fica-se com:

$$\begin{aligned} A_{2,0_2}^{[\ell,\tau]} &= \left(-\frac{\Sigma_{1_2}}{2D_2} \right) A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + \frac{1}{2D_2} \left(\frac{1}{v_2 \Delta t} + \Sigma_{r_2}(t) \right) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + \left[-\frac{B_{0_2}}{2D_2 v_2 \Delta t} \right], \\ &= Q_{1_2} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_2}(t) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_2}, \end{aligned} \quad (3.47)$$

para o grupo 2 de energia.

Ou seja, de forma geral:

$$A_{2,0_g}^{[\ell,\tau]} = Q_{1_g} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_g}(t) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_g}, \quad (3.48)$$

nesse caso, para $g=1, 2$.

Desta forma, os coeficientes de x^2 vão depender somente dos termos independentes. Com isso e com a equação (3.39), reescreve-se $\phi_g^{[\ell,\tau]}$, com $g=1,2$, e obtém-se:

$$\begin{aligned} \phi_g^{[\ell,\tau]}(x, t) &= \sum_{n=0}^2 \sum_{m=0}^1 A_{n,m_g}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n (t - t_c^{[\tau]})^m, \\ &= \sum_{n=0}^2 \left(A_{n,0_g}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n + A_{n,1_g}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n (t - t_c^{[\tau]}) \right), \end{aligned} \quad (3.49)$$

assim,

$$\begin{aligned}
\phi_g^{[\ell,\tau]}(x,t) &= \sum_{n=0}^2 \left(A_{n,0_g}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]})^n + \frac{A_{n,0_g}^{[\ell,\tau]} - B_{n_g}}{\Delta t} (x - x_c^{[\ell]})^n (t - t_c^{[\tau]}) \right), \\
&= \sum_{n=0}^2 \left(A_{n,0_g}^{[\ell,\tau]} \left(1 + \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) - \frac{B_{n_g}(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) (x - x_c^{[\ell]})^n. \quad (3.50)
\end{aligned}$$

Realizando o somatório em (3.50), fica-se com:

$$\begin{aligned}
\phi_g^{[\ell,\tau]}(x,t) &= \left(A_{2,0_g}^{[\ell,\tau]} \left(1 + \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) - \frac{B_{2_g}(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) (x - x_c^{[\ell]})^2 \\
&\quad + \left(A_{1,0_g}^{[\ell,\tau]} \left(1 + \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) - \frac{B_{1_g}(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) (x - x_c^{[\ell]}) \\
&\quad + \left(A_{0,0_g}^{[\ell,\tau]} \left(1 + \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) - \frac{B_{0_g}(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right). \quad (3.51)
\end{aligned}$$

O próximo passo é substituir $A_{2,0_g}^{[\ell,\tau]}$ pela expressão encontrada anteriormente na equação (3.48). Assim, obtém-se:

$$\begin{aligned}
\phi_g^{[\ell,\tau]}(x,t) &= \left((Q_{1_g} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_g}(t) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_g}) \left(1 + \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) - \frac{B_{2_g}(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) (x - x_c^{[\ell]})^2 \\
&\quad + \left(A_{1,0_g}^{[\ell,\tau]} \left(1 + \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) - \frac{B_{1_g}(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) (x - x_c^{[\ell]}) \\
&\quad + \left(A_{0,0_g}^{[\ell,\tau]} \left(1 + \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right) - \frac{B_{0_g}(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t} \right), \quad (3.52)
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\begin{aligned}
\phi_g^{[\ell,\tau]}(x,t) &= \left[(Q_{1_g} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_g}(t) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_g}) (x - x_c^{[\ell]})^2 + A_{1,0_g}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]}) + A_{0,0_g}^{[\ell,\tau]} \right] \\
&\quad + \left[(Q_{1_g} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_g}(t) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_g} - B_{2_g}) (x - x_c^{[\ell]})^2 \right. \\
&\quad \left. + (A_{1,0_g}^{[\ell,\tau]} - B_{1_g}) (x - x_c^{[\ell]}) + (A_{0,0_g}^{[\ell,\tau]} - B_{0_g}) \right] \frac{(t - t_c^{[\tau]})}{\Delta t}. \quad (3.53)
\end{aligned}$$

Então, pode-se montar as expressões para as condições de contorno e interface. Para a condição de continuidade de fluxo, pode-se escrever:

$$\begin{aligned}
\phi_g^{[\ell,\tau]}(\Delta x, t) &= \phi_g^{[\ell+1,\tau]}(-\Delta x, t), \\
&\sum_{m=0}^1 A_{2,m_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 (t - t_c^{[\tau]})^m + A_{1,m_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x (t - t_c^{[\tau]})^m + A_{0,m_g}^{[\ell,\tau]} (t - t_c^{[\tau]})^m \\
&= \sum_{m=0}^1 A_{2,m_g}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 (t - t_c^{[\tau]})^m + A_{1,m_g}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x) (t - t_c^{[\tau]})^m + A_{0,m_g}^{[\ell+1,\tau]} (t - t_c^{[\tau]})^m. \quad (3.54)
\end{aligned}$$

Ou seja, a equação (3.54) para $m = 0$ vale:

$$A_{2,0_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 + A_{1,0_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x + A_{0,0_g}^{[\ell,\tau]} = A_{2,0_g}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 + A_{1,0_g}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x) + A_{0,0_g}^{[\ell+1,\tau]}, \quad (3.55)$$

e para $m = 1$:

$$A_{2,1_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 + A_{1,1_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x + A_{0,1_g}^{[\ell,\tau]} = A_{2,1_g}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 + A_{1,1_g}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x) + A_{0,1_g}^{[\ell+1,\tau]}. \quad (3.56)$$

Porém, de acordo com a equação (3.39), tem-se que:

$$\begin{aligned}
&\frac{A_{2,0_j}^{[\ell,\tau]} - B_{2_j}^{[\ell,\tau]}}{\Delta t} \Delta x^2 + \frac{A_{1,0_j}^{[\ell,\tau]} - B_{1_j}^{[\ell,\tau]}}{\Delta t} \Delta x + \frac{A_{0,0_j}^{[\ell,\tau]} - B_{0_j}^{[\ell,\tau]}}{\Delta t} \\
&= \frac{A_{2,0_j}^{[\ell+1,\tau]} - B_{2_j}^{[\ell+1,\tau]}}{\Delta t} (-\Delta x)^2 + \frac{A_{1,0_j}^{[\ell+1,\tau]} - B_{1_j}^{[\ell+1,\tau]}}{\Delta t} (-\Delta x) + \frac{A_{0,0_j}^{[\ell+1,\tau]} - B_{0_j}^{[\ell+1,\tau]}}{\Delta t}. \quad (3.57)
\end{aligned}$$

Reorganizando os termos da equação (3.57), obtém-se:

$$\begin{aligned}
&\left(A_{2,0_j}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 + A_{1,0_j}^{[\ell,\tau]} \Delta x + A_{0,0_j}^{[\ell,\tau]} \right) - \left(B_{2_j}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 + B_{1_j}^{[\ell,\tau]} \Delta x + B_{0_j}^{[\ell,\tau]} \right) \\
&= \left(A_{2,0_j}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 + A_{1,0_j}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x) + A_{0,0_j}^{[\ell+1,\tau]} \right) \\
&\quad - \left(B_{2_j}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 + B_{1_j}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x) + B_{0_j}^{[\ell+1,\tau]} \right). \quad (3.58)
\end{aligned}$$

Pode-se observar que, como a condição inicial $B_{n_j}^{[\ell,\tau]}$ certamente satisfaz as condições de contorno, os segundos parênteses de cada lado da igualdade na equação (3.58) se cancelam, restando apenas a condição de contorno redundante à $m = 0$. Portanto, para $m = 0$, $\phi_g^{[\ell,\tau]} \Big|_{m=0}$ toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \phi_g^{[\ell,\tau]} \Big|_{m=0} &= \left(Q_{1g} A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2g}(t) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_g} \right) (x - x_c^{[\ell]})^2 \\ &\quad + A_{1,0_g}^{[\ell,\tau]} (x - x_c^{[\ell]}) + A_{0,0_g}^{[\ell,\tau]}, \end{aligned} \quad (3.59)$$

que, por conveniência, pode ser reescrito como segue, inicialmente para o grupo 1:

$$\begin{aligned} \phi_1^{[\ell,\tau]} \Big|_{m=0} &= (x - x_c^{[\ell]}) A_{1,0_1}^{[\ell,\tau]} + (Q_{1_1} (x - x_c^{[\ell]})^2 + 1) A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_1}(t) (x - x_c^{[\ell]})^2 A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} \\ &\quad + Q_{ci_1} (x - x_c^{[\ell]})^2, \end{aligned} \quad (3.60)$$

e para o grupo 2:

$$\begin{aligned} \phi_2^{[\ell,\tau]} \Big|_{m=0} &= (x - x_c^{[\ell]}) A_{1,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{1_2} (x - x_c^{[\ell]})^2 A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + (Q_{2_2}(t) (x - x_c^{[\ell]})^2 + 1) A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} \\ &\quad + Q_{ci_2} (x - x_c^{[\ell]})^2. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Com isso, as condições de continuidade do fluxo podem ser reescritas da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \Delta x A_{1,0_1}^{[\ell,\tau]} + \left(Q_{1_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 + 1 \right) A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_1}(t)^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + Q_{ci_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 = \\ - \Delta x A_{1,0_1}^{[\ell+1,\tau]} + \left(Q_{1_1}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 + 1 \right) A_{0,0_1}^{[\ell+1,\tau]} \\ + Q_{2_1}(t)^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 A_{0,0_2}^{[\ell+1,\tau]} + Q_{ci_1}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2, \end{aligned} \quad (3.62)$$

para o grupo 1 de energia. Reorganizando os termos, para o grupo 1:

$$\begin{aligned} \Delta x A_{1,0_1}^{[\ell,\tau]} + \left(Q_{1_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 + 1 \right) A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + Q_{2_1}(t)^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + \Delta x A_{1,0_1}^{[\ell+1,\tau]} \\ - \left(Q_{1_1}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 + 1 \right) A_{0,0_1}^{[\ell+1,\tau]} - Q_{2_1}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 A_{0,0_2}^{[\ell+1,\tau]} \\ = Q_{ci_1}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 - Q_{ci_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2. \end{aligned} \quad (3.63)$$

De forma semelhante, para o grupo 2 de energia, obtém-se:

$$\begin{aligned}
Q_{12}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 A_{0,01}^{[\ell,\tau]} + \Delta x A_{1,02}^{[\ell,\tau]} + (Q_{22}(t)^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 + 1) A_{0,02}^{[\ell,\tau]} - Q_{12}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 A_{0,01}^{[\ell+1,\tau]} \\
+ \Delta x A_{1,02}^{[\ell+1,\tau]} - \left(Q_{22}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 + 1 \right) A_{0,02}^{[\ell+1,\tau]} \\
= Q_{ci_2}^{[\ell+1,\tau]} (-\Delta x)^2 - Q_{ci_2}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2. \quad (3.64)
\end{aligned}$$

Portanto, as equações (3.63) e (3.64) são as condições de continuidade para os fluxos escalares de nêutrons, para o grupo 1 e 2 de energia, respectivamente. Agora, realiza-se um procedimento similar para que sejam obtidas expressões para a outra condição de interface, dada pela continuidade da corrente de nêutrons.

Analisando inicialmente a derivada de primeira ordem do fluxo de nêutrons, tem-se que:

$$\left. \frac{\partial \phi_g^{[\ell,\tau]}}{\partial x} \right|_{m=0} = A_{1,0g}^{[\ell,\tau]} + 2Q_{1g}(x - x_c^{[\ell]}) A_{0,01}^{[\ell,\tau]} + 2Q_{2g}(x - x_c^{[\ell]})(t) A_{0,02}^{[\ell,\tau]} + 2Q_{ci_g}(x - x_c^{[\ell]}). \quad (3.65)$$

Logo, para a continuidade de corrente de nêutrons pode-se definir:

$$\begin{aligned}
& D_g^{[\ell,\tau]} \left(A_{1,0g}^{[\ell,\tau]} + 2Q_{1g}^{[\ell,\tau]} \Delta x A_{0,01}^{[\ell,\tau]} + 2Q_{2g}^{[\ell,\tau]}(t) \Delta x A_{0,02}^{[\ell,\tau]} + 2Q_{ci_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x \right) \\
= D_g^{[\ell+1,\tau]} \left(A_{1,0g}^{[\ell+1,\tau]} - 2Q_{1g}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x A_{0,01}^{[\ell+1,\tau]} - 2Q_{2g}^{[\ell+1,\tau]}(t) \Delta x A_{0,02}^{[\ell+1,\tau]} - 2Q_{ci_g}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x \right), \quad (3.66)
\end{aligned}$$

reorganizando os termos, tem-se:

$$\begin{aligned}
D_g^{[\ell,\tau]} A_{1,0g}^{[\ell,\tau]} + 2D_g^{[\ell,\tau]} Q_{1g}^{[\ell,\tau]} \Delta x A_{0,01}^{[\ell,\tau]} + 2D_g^{[\ell,\tau]} Q_{2g}^{[\ell,\tau]}(t) \Delta x A_{0,02}^{[\ell,\tau]} - D_g^{[\ell+1,\tau]} A_{1,0g}^{[\ell+1,\tau]} \\
+ 2D_g^{[\ell+1,\tau]} Q_{1g}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x A_{0,01}^{[\ell+1,\tau]} + 2D_g^{[\ell+1,\tau]} Q_{2g}^{[\ell+1,\tau]}(t) \Delta x A_{0,02}^{[\ell+1,\tau]} = \\
- 2D_g^{[\ell+1,\tau]} Q_{ci_g}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x - 2D_g^{[\ell,\tau]} Q_{ci_g}^{[\ell,\tau]} \Delta x. \quad (3.67)
\end{aligned}$$

Ou seja, a continuidade de corrente de nêutrons para o grupo 1 de energia pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
& D_1^{[\ell,\tau]} A_{1,0_1}^{[\ell,\tau]} + 2D_1^{[\ell,\tau]} Q_{1_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + 2D_1^{[\ell,\tau]} Q_{2_1}^{[\ell,\tau]}(t) \Delta x A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} - D_1^{[\ell+1,\tau]} A_{1,0_1}^{[\ell+1,\tau]} \\
& + 2D_1^{[\ell+1,\tau]} Q_{1_1}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x A_{0,0_1}^{[\ell+1,\tau]} + 2D_1^{[\ell+1,\tau]} Q_{2_1}^{[\ell+1,\tau]}(t) \Delta x A_{0,0_2}^{[\ell+1,\tau]} = \\
& -2D_1^{[\ell+1,\tau]} Q_{ci_1}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x - 2D_1^{[\ell,\tau]} Q_{ci_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x, \quad (3.68)
\end{aligned}$$

e para o grupo 2 de energia:

$$\begin{aligned}
& 2D_2^{[\ell,\tau]} Q_{1_2}^{[\ell]} \Delta x A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]} + D_2^{[\ell,\tau]} A_{1,0_2}^{[\ell,\tau]} + 2D_2^{[\ell,\tau]} Q_{2_2}^{[\ell,\tau]}(t) \Delta x A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]} + 2D_2^{[\ell+1,\tau]} Q_{1_2}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x A_{0,0_1}^{[\ell+1,\tau]} \\
& - D_2^{[\ell+1,\tau]} A_{1,0_2}^{[\ell+1,\tau]} + 2D_2^{[\ell+1,\tau]} Q_{2_2}^{[\ell+1,\tau]}(t) \Delta x A_{0,0_2}^{[\ell+1,\tau]} = \\
& -2D_2^{[\ell+1,\tau]} Q_{ci_2}^{[\ell+1,\tau]} \Delta x - 2D_2^{[\ell,\tau]} Q_{ci_2}^{[\ell,\tau]} \Delta x. \quad (3.69)
\end{aligned}$$

Desta forma obtêm-se 4 equações para cada célula, sendo 2 equações para a continuidade de fluxo e 2 equações para a continuidade de corrente, sendo que têm-se 4 incógnitas ($A_{1,0_1}^{[\ell,\tau]}$, $A_{0,0_1}^{[\ell,\tau]}$, $A_{1,0_2}^{[\ell,\tau]}$ e $A_{0,0_2}^{[\ell,\tau]}$), forma-se assim um sistema linear $4 \times L$ não homogêneo determinado, onde L é o número de células. Esse sistema linear pode ser escrito na forma matricial,

$$\mathbf{M}^{[\ell,\tau]}(t) \mathbf{Y}^{[\ell,\tau]} = \mathbf{S}^{[\ell,\tau]}, \quad (3.70)$$

onde,

$$\mathbf{M}^{[\ell,\tau]}(t) = \begin{bmatrix} \mathbf{CC}^{[1,\tau]} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{CI}_+^{[1,\tau]} & \mathbf{CI}_-^{[2,\tau]} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{CI}_+^{[2,\tau]} & \mathbf{CI}_-^{[3,\tau]} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{CI}_+^{[L-1,\tau]} & \mathbf{CI}_-^{[L,\tau]} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{CC}^{[L,\tau]} \end{bmatrix}, \quad (3.71)$$

em que,

$$\begin{aligned}
\mathbf{CC}^{(1,\tau)}(t) &= \begin{bmatrix} -\Delta x & Q_{1_1}^{[1,\tau]}(-\Delta x)^2 + 1 & 0 & Q_{2_1}^{[1,\tau]}(t)(-\Delta x)^2 \\ 0 & Q_{1_2}^{[1,\tau]}(-\Delta x)^2 & -\Delta x & Q_{2_2}^{[1,\tau]}(t)(-\Delta x)^2 + 1 \end{bmatrix}, \\
\mathbf{CI}_+^{[\ell,\tau]}(t) &= \begin{bmatrix} \Delta x & Q_{1_1}^{[\ell,\tau]}\Delta x^2 + 1 & 0 & Q_{2_1}^{[\ell,\tau]}(t)\Delta x^2 \\ 0 & Q_{1_2}^{[\ell,\tau]}\Delta x^2 + 1 & \Delta x & Q_{2_2}^{[\ell,\tau]}(t)\Delta x^2 \\ D_1^{[\ell,\tau]} & 2D_1^{[\ell,\tau]}Q_{1_1}^{[\ell]} \Delta x & 0 & 2D_1^{[\ell,\tau]}Q_{2_1}^{[\ell]}(t)\Delta x \\ 0 & 2D_2^{[\ell,\tau]}Q_{1_2}^{[\ell]} \Delta x & D_2^{[\ell,\tau]} & 2D_2^{[\ell,\tau]}Q_{2_2}^{[\ell]}(t)\Delta x \end{bmatrix}, \\
\mathbf{CI}_-^{[\ell,\tau]}(t) &= \begin{bmatrix} -(\Delta x) & -\left(Q_{1_1}^{[\ell,\tau]}(-\Delta x)^2 + 1\right) & 0 & -Q_{2_1}^{[\ell,\tau]}(t)(-\Delta x)^2 \\ 0 & -\left(Q_{1_2}^{[\ell,\tau]}(-\Delta x)^2 + 1\right) & -(-\Delta x) & -Q_{2_2}^{[\ell,\tau]}(t)(-\Delta x)^2 \\ -D_1^{[\ell,\tau]} & -2D_1^{[\ell,\tau]}Q_{1_1}^{[\ell,\tau]}(-\Delta x) & 0 & -2D_1^{[\ell,\tau]}Q_{2_1}^{[\ell,\tau]}(t)(-\Delta x) \\ 0 & -2D_2^{[\ell,\tau]}Q_{1_2}^{[\ell,\tau]}(-\Delta x) & -D_2^{[\ell,\tau]} & -2D_2^{[\ell,\tau]}Q_{2_2}^{[\ell,\tau]}(t)(-\Delta x) \end{bmatrix}, \\
\mathbf{CC}^{[L,\tau]}(t) &= \begin{bmatrix} \Delta x & Q_{1_1}^{[L,\tau]}\Delta x^2 + 1 & 0 & Q_{2_1}^{[L,\tau]}(t)\Delta x^2 \\ 0 & Q_{1_2}^{[L,\tau]}\Delta x^2 & \Delta x & Q_{2_2}^{[L,\tau]}(t)\Delta x^2 + 1 \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

O termo fonte do sistema linear (3.70) é escrito como:

$$\mathbf{S}^{[\ell,\tau]} = \left[\mathbf{sc}^{[1,\tau]} \quad \mathbf{si}^{[1,\tau]} \quad \mathbf{si}^{[2,\tau]} \quad \dots \quad \mathbf{si}^{[L-1,\tau]} \quad \mathbf{sc}^{[L,\tau]} \right]^T, \quad (3.72)$$

onde,

$$\mathbf{sc}^{[1,\tau]} = \begin{bmatrix} -Q_{ci_1}^{[1,\tau]}(-\Delta x)^2 \\ -Q_{ci_2}^{[1,\tau]}(-\Delta x)^2 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{si}^{[\ell,\tau]} = \begin{bmatrix} Q_{ci_1}^{[\ell+1,\tau]}(-\Delta x)^2 - Q_{ci_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 \\ Q_{ci_2}^{[\ell+1,\tau]}(-\Delta x)^2 - Q_{ci_2}^{[\ell,\tau]} \Delta x^2 \\ 2D_1^{[\ell+1,\tau]}Q_{ci_1}^{[\ell+1,\tau]}(-\Delta x) - 2D_1^{[\ell,\tau]}Q_{ci_1}^{[\ell,\tau]} \Delta x \\ 2D_2^{[\ell+1,\tau]}Q_{ci_2}^{[\ell+1,\tau]}(-\Delta x) - 2D_2^{[\ell,\tau]}Q_{ci_2}^{[\ell,\tau]} \Delta x \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{sc}^{[L,\tau]} = \begin{bmatrix} -Q_{ci_1}^{[L,\tau]} \Delta x^2 \\ -Q_{ci_2}^{[L,\tau]} \Delta x^2 \end{bmatrix}.$$

O vetor solução $\mathbf{Y}^{[\ell,\tau]}$ tem a forma:

$$\mathbf{Y}^{[\ell,\tau]} = \left[A_{1,0_1}^{[1,\tau]} \quad A_{0,0_1}^{[1,\tau]} \quad A_{1,0_2}^{[1,\tau]} \quad A_{0,0_2}^{[1,\tau]} \quad A_{1,0_1}^{[2,\tau]} \quad A_{0,0_1}^{[2,\tau]} \quad A_{1,0_2}^{[2,\tau]} \quad A_{0,0_2}^{[2,\tau]} \quad \dots \right]^T. \quad (3.73)$$

No sistema linear (3.70), a matriz $\mathbf{M}^{[\ell,\tau]}$ carrega a dependência temporal do transiente, portanto o sistema é resolvido para cada intervalo Δt , sendo que a solução encontrada para $(t - \Delta t)$ é usada como condição inicial para o próximo passo de tempo, este esquema recursivo é chamado de *continuação analítica*. O procedimento para estabelecer a convergência em t é semelhante ao visto para a variável x , com a diferença que se consideram apenas dois termos da série de potências ao invés de três.

Portanto, resolvendo o sistema linear (3.70) têm-se os coeficientes das séries de Taylor descritas nas equações (3.32), e substituindo os coeficientes nas séries truncadas e realizando o somatório, obtém-se a solução do problema dado pelas equações (3.30) e (3.31).

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo, a metodologia proposta neste trabalho e descrita no capítulo 3, é aplicada em um *benchmark* que consiste em um problema de difusão estacionário e em problemas de cinética considerando 3 tipos de transientes: rampa positiva, rampa negativa e senoidal. Além desses, mais um transiente é considerado: uma mudança instantânea na seção de choque de fissão. Os resultados obtidos neste trabalho são comparados com sucesso com os resultados obtidos por Quintero-Leyva [Quintero-Leyva, 2010].

4.1 Caso 1: Difusão estacionária

Nesta seção, aplica-se a metodologia anteriormente apresentada para resolver um *benchmark* do *Argonne National Laboratory* [National Energy Software Center, 1985] descrito por Pollard [Pollard, 1977] e Quintero-Leyva [Quintero-Leyva, 2010]. Este problema consiste de um reator unidimensional com 3 regiões e com parâmetros nucleares apresentados na Tabela 4.1. A região 1 é limitada pelas posições das interfaces em $x^{[0]} = 0 \text{ cm}$ e $x^{[1]} = 40 \text{ cm}$, a região 2 pela posição das interfaces em $x^{[1]} = 40 \text{ cm}$ e $x^{[2]} = 200 \text{ cm}$ e a região 3 por $x^{[2]} = 200 \text{ cm}$ e $x^{[3]} = 240 \text{ cm}$. As regiões 1 e 3 possuem o mesmo material, logo são descritas pelos mesmos parâmetros nucleares.

Tabela 4.1: Parâmetros nucleares [Quintero-Leyva, 2010]

| | $D_g^{[r]} [cm]$ | | $\Sigma_{rg}^{[r]} [cm^{-1}]$ | | $\nu\Sigma_{fg}^{[r]} [cm^{-1}]$ | | $\Sigma_{s12}^{[r]} [cm^{-1}]$ |
|------------|------------------|---------|-------------------------------|---------|----------------------------------|---------|--------------------------------|
| Região r | $g = 1$ | $g = 2$ | $g = 1$ | $g = 2$ | $g = 1$ | $g = 2$ | - |
| 1 e 3 | 1,5 | 0,5 | 0,026 | 0,18 | 0,01 | 0,2 | 0,015 |
| 2 | 1,0 | 0,5 | 0,02 | 0,08 | 0,005 | 0,099 | 0,01 |

O objetivo inicialmente é encontrar um Δx apropriado, cuja magnitude seja sufi-

ciente para que as expressões (3.1.2) com ordem de truncamento $J = 2$ tenham uma boa aproximação. Então, usando (3.18) com $\varepsilon = 0,001$, alguns cálculos são realizados para o problema teste. Utilizando os parâmetros nucleares e a geometria mencionados anteriormente, calcula-se o quarto termo da série (3.1.2) ($J = 3$) para o grupo rápido de energia considerando vários valores para Δx . A Tabela 4.2 mostra os valores numéricos para o valor máximo de $A_{13}^{[\ell]}(x - x_c)^3$ para alguns valores de Δx .

Tabela 4.2: Cálculo do Δx

| Δx [cm] | $\max \left\{ A_{13}^{[\ell]}(x - x_c)^3 \right\}$ |
|-----------------|----------------------------------------------------|
| 10,0 | 0,1448804 |
| 5,0 | 0,0327128 |
| 2,0 | 0,0035102 |
| 1,0 | 0,0005527 |
| 0,5 | 0,0000789 |

Por meio destes resultados e da precisão previamente escolhida ($\varepsilon = 0,001$), pode-se fixar $\Delta x = 1,0$ cm e conseqüentemente $L = 240$. Para o método da potência os critérios de parada utilizados foram $\epsilon_k = \epsilon_\phi = 10^{-15}$, nas equações (3.6) e (3.7) respectivamente.

Os resultados obtidos para o fluxo rápido e para o fluxo térmico são mostrados na Figura 4.1. Resultados numéricos para o fator de multiplicação efetivo e para as frações de potência de cada região são apresentados na Tabela 4.3. O valor máximo para o fluxo rápido para a potência gerada de 1 W foi de $2,81 \times 10^{10}$ $cm^{-2}s^{-1}$ para $x = 33$ cm e $x = 207$ cm, já para o grupo térmico o valor máximo foi $2,81 \times 10^9$ $cm^{-2}s^{-1}$ para $x = 44$ cm e $x = 196$ cm. Os resultados obtidos estão de acordo com os resultados de Quintero-Leyva [Quintero-Leyva, 2010].

Como descrito na seção 3.1.3, utiliza-se um critério de convergência inspirado no critério de Lipschitz para funções contínuas. Segundo esse critério, deve existir um κ tal que:

$$|\phi_g(x) - \phi_g(x_i)| \leq \kappa |x - x_0| < \kappa \delta = \hat{\epsilon}, \quad (4.1)$$

com x e x_i sendo quaisquer pontos do domínio. Para o *benchmark* em questão, foram calculados os valores máximos de κ . Para o fluxo rápido, o valor máximo de κ foi de 0,4796576 e o valor máximo de κ para o fluxo térmico foi de 0,0599387.

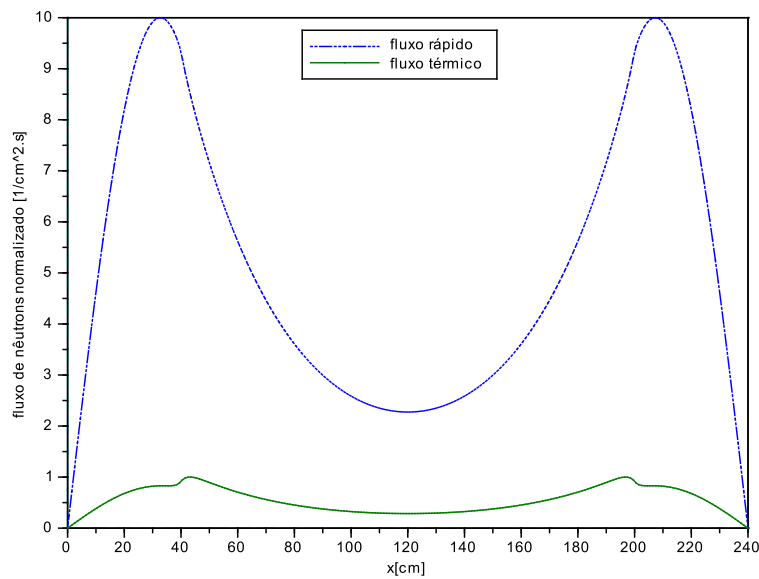


Figura 4.1: Fluxo de nêutrons para o caso estacionário.

Tabela 4.3: Resultados numéricos para o k e para a Fração de Potência

| | Série de Taylor | Ref.[Quintero-Leyva, 2010] |
|-----------------------------|-----------------|----------------------------|
| k | 0,90160 | 0,90155 |
| Fração de Potência-Região 1 | 0,2789 | 0,2790 |
| Fração de Potência-Região 2 | 0,4422 | 0,4421 |
| Fração de Potência-Região 3 | 0,2789 | 0,2790 |

4.2 Caso 2: Cinética de difusão

Como descrito na seção 3.2, a metodologia também é aplicada para problemas de cinética incluindo os nêutrons atrasados. Nesse caso, são considerados 6 grupos de nêutrons atrasados, mas vale destacar que o método não impõe limitação quanto a esse número. Os parâmetros nucleares e a geometria do problema são os mesmos do caso estacionário. Os parâmetros nucleares referentes aos nêutrons atrasados são mostrados na Tabela 4.4. A condição inicial utilizada é a solução do problema estacionário de difusão apresentada na seção anterior. A velocidade dos nêutrons para o grupo rápido é $v_1 = 1.0 \times 10^7 \text{ cm/s}$ e para o grupo térmico é $v_2 = 3.0 \times 10^5 \text{ cm/s}$, para todas as regiões. Em todos os casos de cinética consideramos $\Delta t = 0,01 \text{ s}$.

Tabela 4.4: Parâmetros dos nêutrons atrasados [Quintero-Leyva, 2010].

| i | β_i | $\lambda_i [s^{-1}]$ |
|---|-----------|----------------------|
| 1 | 0,00025 | 0,0124 |
| 2 | 0,00164 | 0,0305 |
| 3 | 0,00147 | 0,1110 |
| 4 | 0,00296 | 0,3010 |
| 5 | 0,00086 | 1,1400 |
| 6 | 0,00032 | 3,0100 |

Os cálculos são realizados para quatro tipos diferentes de transientes, que serão detalhados nas seções seguintes.

4.2.1 Caso 2a: transiente do tipo rampa positiva

O primeiro caso trata-se de um aumento linear na seção de choque de remoção (absorção) para o grupo térmico na região 1 de 3% (0.1854) em 1 segundo. Os resultados obtidos para o fluxo rápido para diferentes tempos são mostrados na Figura 4.2, e os resultados para o fluxo térmico são mostrados na Figura 4.3. O resultado para a potência normalizada está representado na Figura 4.4. Observando o gráfico da potência, nota-se que ela diminui com o tempo, o que é esperado já que nesse caso a remoção de nêutrons está aumentando.

O valor máximo do parâmetro κ , referente à convergência, é de 0,4359502 para o fluxo rápido e de 0,0540383 para o fluxo térmico, para $t = 2s$.

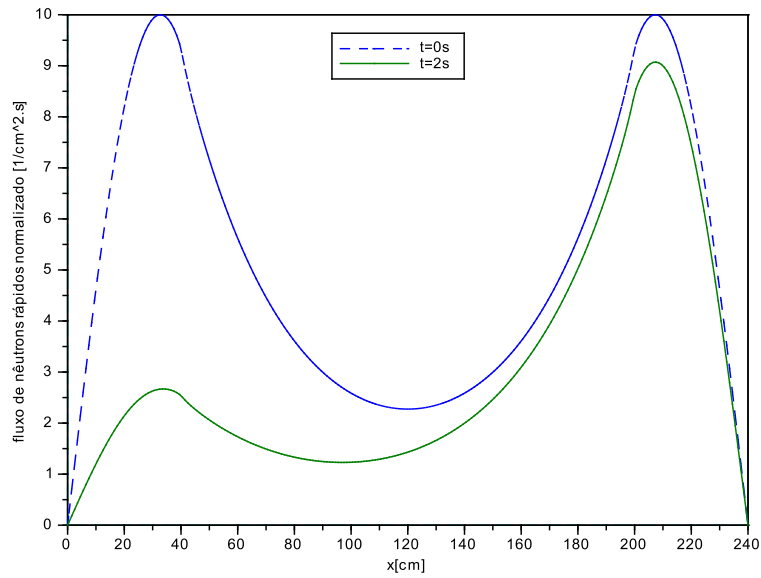


Figura 4.2: Fluxo de nêutrons rápidos para um transiente do tipo rampa positiva.

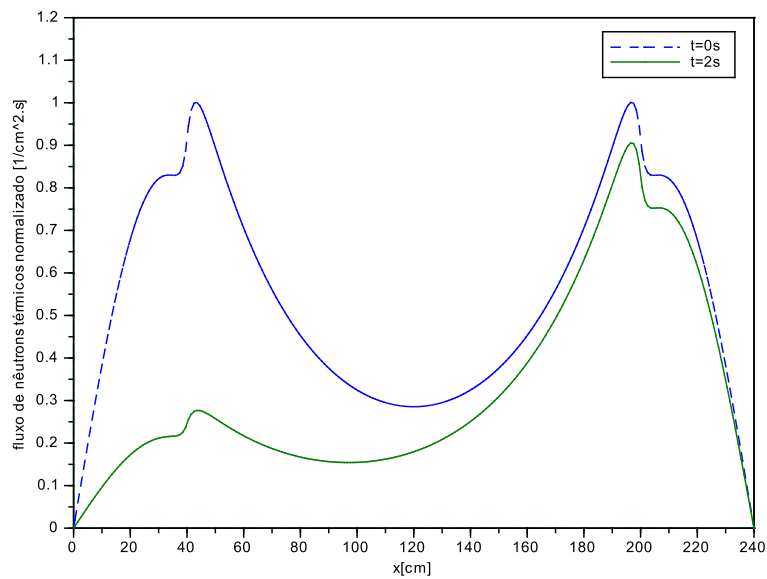


Figura 4.3: Fluxo de nêutrons térmicos para um transiente do tipo rampa positiva.

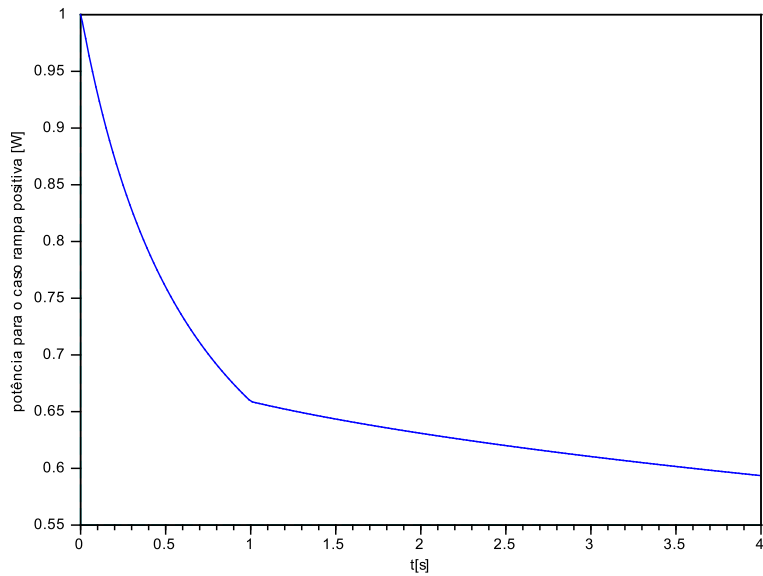


Figura 4.4: Potência normalizada para um transiente do tipo rampa positiva.

4.2.2 Caso 2b: transiente do tipo rampa negativa

O segundo caso trata-se de um decréscimo linear na seção de choque de remoção para o grupo térmico na região 1 de 1% (0.1782) em 1 segundo. Os resultados obtidos para o fluxos rápido para os tempos de 0 e 4 segundos são mostrados na Figura 4.5 e os resultados para o fluxo térmico para os mesmos valores de tempo são apresentados na Figura 4.6. O resultado para a potência normalizada está representado na Figura 4.7. Observando o gráfico da potência, nota-se que ela aumenta com o tempo, o que é esperado já que nesse caso a remoção de nêutrons está diminuindo.

O valor máximo do parâmetro κ , referente à convergência, é de 2,3500565 para o fluxo rápido e de 0,2728593 para o fluxo térmico, para $t = 4s$.

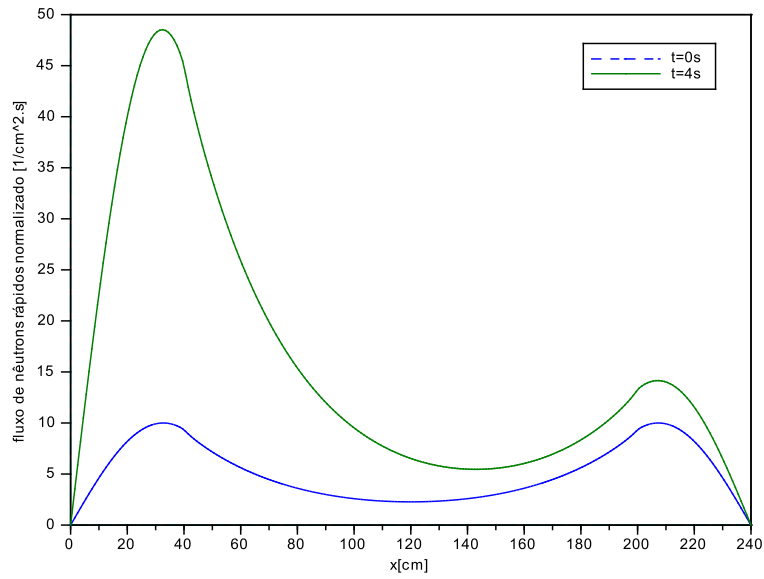


Figura 4.5: Fluxo de nêutrons rápidos para um transiente do tipo rampa negativa.

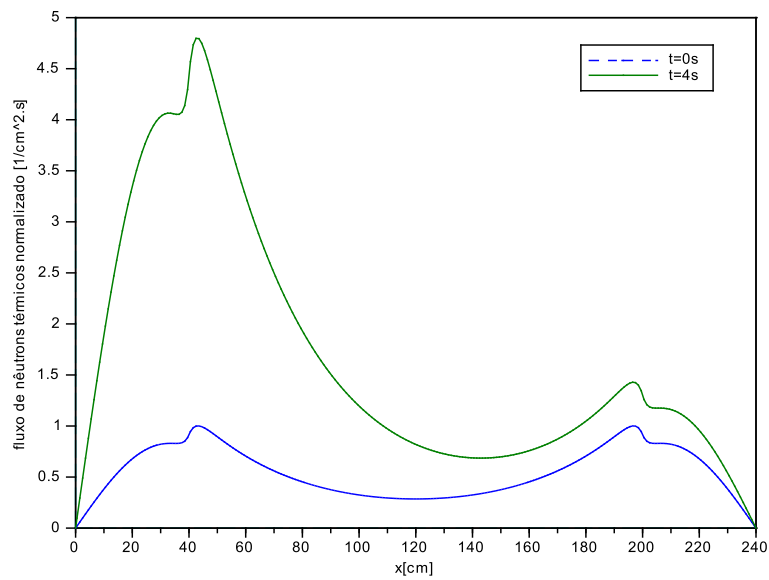


Figura 4.6: Fluxo de nêutrons térmicos para um transiente do tipo rampa negativa.

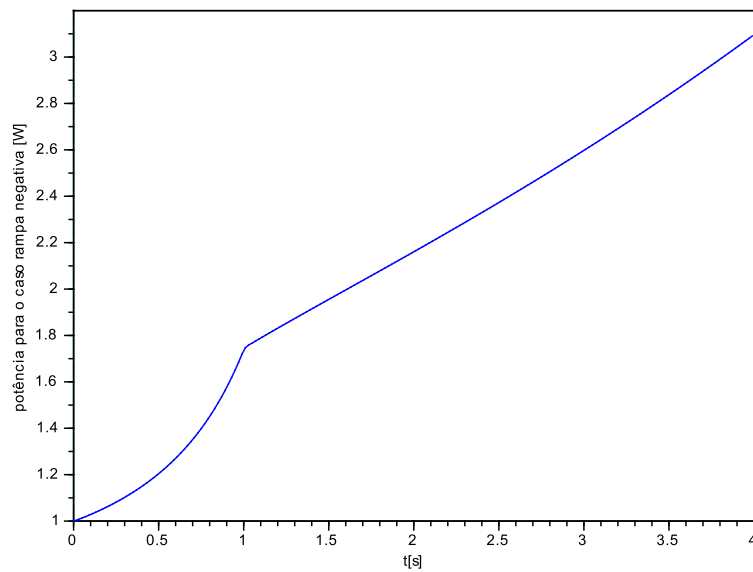


Figura 4.7: Potência normalizada para um transiente do tipo rampa negativa.

4.2.3 Caso 2c: transiente do tipo senoidal

O terceiro caso trata-se de uma mudança senoidal de período de 1 segundo com máxima amplitude de 1%: $\Sigma_{r2}(t) = (1 + 0,01\text{sen}(2\pi t))$ na seção de choque de remoção do grupo térmico na região 1 continuamente por 4 segundos. O fluxo de nêutrons rápidos está mostrado na Figura 4.8 e o fluxo de nêutrons térmicos na Figura 4.9. O resultado para a potência total normalizada até 4 segundos está mostrado na Figura 4.10.

O valor máximo do parâmetro κ , referente à convergência, é de 0,0588671 para o fluxo rápido e de 0,0073139 para o fluxo térmico, para $t = 4s$.

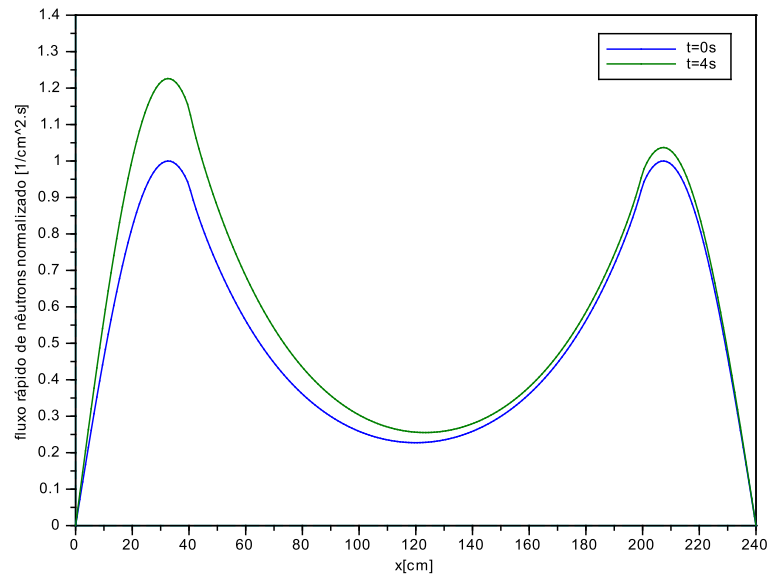


Figura 4.8: Fluxo de nêutrons rápidos para um transiente do tipo senoidal.

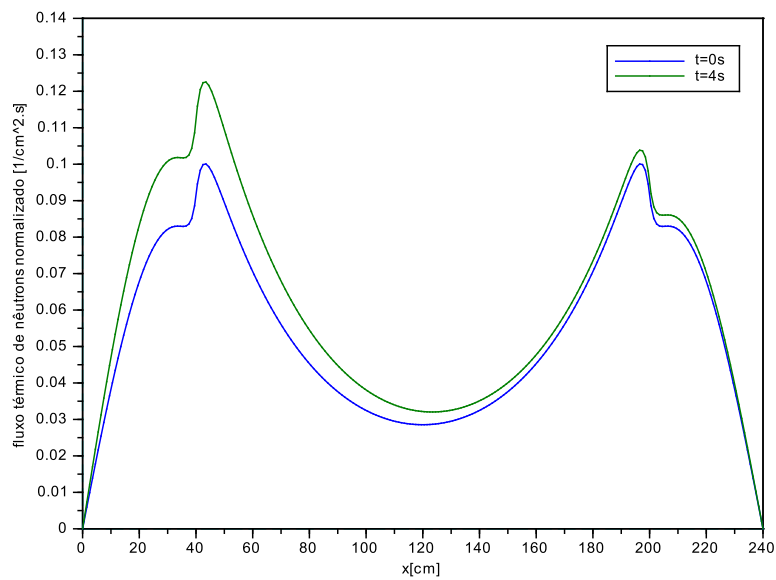


Figura 4.9: Fluxo de nêutrons térmicos para um transiente do tipo senoidal.

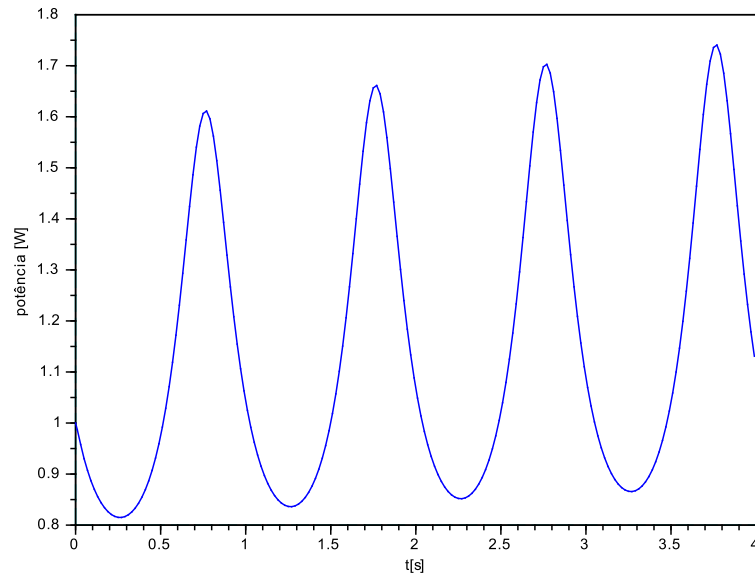


Figura 4.10: Potência total normalizada para um transiente do tipo senoidal.

4.2.4 Caso 2d: transiente do tipo mudança instantânea

O quarto caso transiente trata-se de uma mudança instantânea na seção de choque de fissão do grupo térmico na região 1 por um fator de 1,01882. O fluxo de nêutrons rápidos e o fluxo de nêutrons térmicos para $t = 1s$ são mostrados na Figura 4.11. Observando a Figura 4.11, pode-se notar que ambos os fluxos aumentam muitas ordens de grandeza em todo reator. O resultado para a potência normalizada está representado na Figura 4.12. Observando o gráfico da potência, nota-se que ela aumenta com o tempo, o que é esperado já que nesse caso a fissão de nêutrons está aumentando.

Nesse caso, o valor máximo do parâmetro κ é de 624649,58 para o fluxo rápido e de 72354.964 para o fluxo térmico, para $t = 1s$.

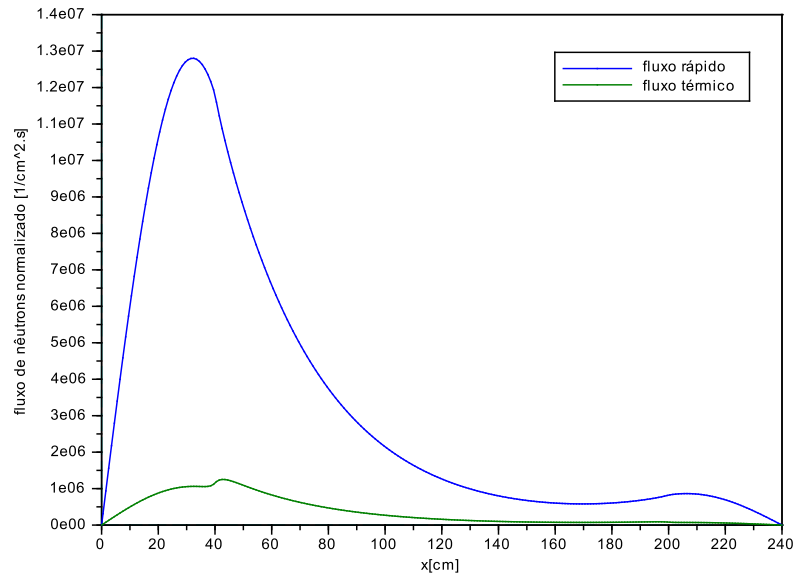


Figura 4.11: Fluxo de nêutrons para um transiente do tipo mudança instantânea em Σ_{f2} para $t=1s$.

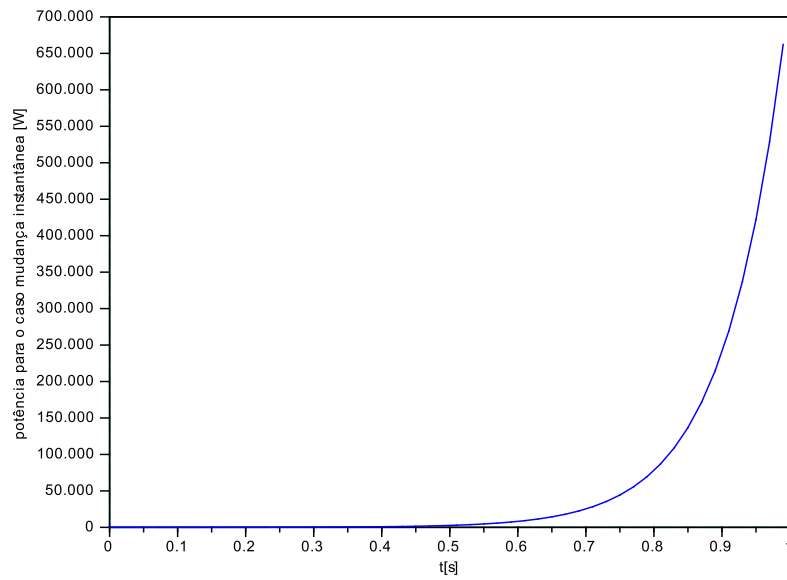


Figura 4.12: Potência normalizada para um transiente do tipo mudança instantânea.

5. CONCLUSÃO

Na presente tese é desenvolvido um método que fornece uma representação analítica para a solução de problemas estacionários e de cinética. Os resultados obtidos, em conjunto com a análise da convergência, mostram a solidez e a precisão dessa metodologia. Apesar desse tipo de problema ser amplamente estudado e discutido na literatura por décadas, o aspecto novo apresentado nesta tese é um controle genuíno da precisão pela utilização de um critério de convergência geralmente ausente nas abordagens anteriores.

A metodologia descrita obteve sucesso em avaliar o comportamento do fluxo de nêutrons em um meio heterogêneo. A diferença entre a abordagem desenvolvida aqui se dá pelo fato da solução obtida ser contínua e com estimativa de erro que permite o controle da precisão da solução. Com pouco esforço computacional, mostra-se ser possível obter uma solução mais apropriada para problemas de difusão e de cinética. Cabe ressaltar que, para esse tipo de problema, os métodos numéricos geralmente usam em seus códigos computacionais um critério de parada comparando as soluções obtidas para dois passos subsequentes. Para demonstrar a falha nesse procedimento vale lembrar alguns fatos conhecidos. (a) Este tipo de procedimento gera uma sequência de Cauchy. (b) Enquanto todas as séries convergentes são do tipo de Cauchy, nem toda sequência de Cauchy é convergente. Um simples contra-exemplo mostra que uma propriedade de estabilidade algorítmica, que é usada no caso do critério de parada, também termina para o caso de uma divergência logarítmica e esse procedimento falha. O procedimento apresentado neste trabalho evita esse tipo de problema pela representação da solução como uma expressão analítica na forma de um polinômio seccionado, que permite estabelecer um critério e fornece um limite superior e inferior para cada intervalo associado, contendo a solução exata no seu interior. Além disso, no limite infinitesimal essa estimativa inferior e superior coincide com a solução exata. Em outras palavras, a solução polinomial obtida converge para a solução exata.

Além disso, é notável que o procedimento proposto tem uma simplicidade inerente quando comparado a alguns métodos que fazem uso de esquemas numéricos, sendo que o

esforço de implementação computacional é semelhante ao esforço requerido pelo método de diferenças finitas, por exemplo. O uso de polinômios de baixa ordem resulta em uma descrição contínua da solução sem a necessidade de interpolação entre pontos vizinhos, que apareceriam como consequência da discretização do domínio como geralmente é feito em algumas abordagens numéricas. Com a metodologia apresentada neste trabalho, as derivadas nas variáveis espacial e temporal são calculadas com base na função expandida em série, enquanto que vários métodos numéricos aproximam os termos derivativos. Neste sentido, a presente análise deste problema é completa do ponto de vista matemático, já que apresenta-se um algoritmo para obter a solução juntamente com uma análise da convergência. Como trabalhos futuros pretende-se continuar a expansão dessa metodologia para problemas multidimensionais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Adams, C. H., 1977. “Current Trends in Methods for Neutron Diffusion Calculations”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 64, pp. 552–562.

Ait-Abderrahim, H. and Stanculescu, A., 2006. “IAEA Coordinate Research Project on Analytical and Experimental Benchmark Analyses of Accelerator Driven Systems”, **Proceedings of ANS Topical Meeting on Reactor Physics - PHYSOR**.

Alcouffe, E. R. and Albrecht, R. W., 1970. “A Generalization of the Finite Difference Approximation Method with an Application to Space-Time Nuclear Reactor Kinetics”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 39, pp. 1–13.

Alvim, A. C. M., 2007. “**Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear**”. Editora Certa, Brasil.

Aviles, B. N. e., 1991. “A variable timestep generalized Runge-Kutta method for the numerical integration of the space-time diffusion equations”, **KAPL-4731**.

Barrio, R., Rodriguez, M., Abad, A., and Blesa, F., 2011. “Breaking the limits: The Taylor series method”, **Applied Mathematics and Computation**, vol. 127, pp. 7940–7954.

Barros, R. C., Alves Filho, H., Orellana, E. T. V., Silva, F. C., Couto, N., Dominguez, D. S., and Hernández, C. R. G., 2003. “The Application of Spectral Nodal Methods to Discrete Ordinates and Diffusion Problems in Cartesian Geometry for Neutron Multiplying Systems”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 42, pp. 385–426.

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

Camargo, D. Q., Bodmann, B. E. J., Vilhena, M. T., Leite, S. Q. B., and Alvim, A. C. M., 2013. “A stochastic model for neutrons simulation considering the spectrum and nuclear properties with continuous dependence of energy”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 69, pp. 59–63.

Ceolin, C., 2010. “**Solução Analítica da Equação Cinética de Difusão Multi-grupo de Nêutrons em Geometria Cartesiana Unidimensional pela Técnica da Transformada Integral**”, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - PROMEC, Porto Alegre, Brasil.

Corliss, G. and Chang, Y. F., 1982. “Solving Ordinary Differential Equations Using Taylor Series”, **ACM Transactions on Mathematical Software**, vol. 8, pp. 114–144.

Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J., 1976. “**Nuclear Reactor Analysis**”. John Wiley & Sons, New York.

Gaboury, G. D., 1993. “**A Space-Time Reactor Simulation**”, Tese de doutorado, Open Access Dissertations and Theses, Paper 2250, Hamilton, Ontario.

Grossman, L. M. and Hennart, J. P., 2007. “Nodal diffusion methods for space-time neutron kinetics”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 49, pp. 181–216.

Kaplan, S., Henry, A. F., Margolis, S. G., and Taylor, J. J., 1964a. “Space-time reactor dynamics”, **Proceedings of the Geneva Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy**, vol. 4, pp. 41–50.

Kaplan, S., Marlowe, O. J., and Bewick, J., 1964b. “Application of Synthesis Techniques to Problems Involving Time Dependence”, **Nucl. Sci. Eng.**, vol. 18, pp. 163–176.

Keepin, G. R., 1965. “**Physics of Nuclear Kinetics**”. Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts.

Lima, Z. R., Silva, F. C., and Alvim, A. C. M., 2009. “A modal multidimensional kinetics method using pseudo-harmonics”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp. 752–759.

Maiorino, J. R., Santos, A., Carluccio, T., Rossi, P. C. R., Antunes, A., Oliveira, F., and Lee, S. M., 2007. “The Participation of IPEN in the AIEA Coordinate Research Projects on Accelerator Driven Systems (ADS)”, **International Nuclear Atlantic Conference - INAC**.

Mitchell, B., 1977. “Taylor series method for the solution of the point kinetics equations”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 4, pp. 169–176.

Nahla, A. A., 2011. “Taylor’s series method for solving the nonlinear point kinetics equations”, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 241, pp. 1592–1595.

Nahla, A. A., Al-Malki, F. A., and Rokaya, M., 2012. “Numerical Techniques for the Neutron Diffusion Equations in the Nuclear Reactors”, **Adv. Studies Theor. Physics**, vol. 6, pp. 649–664.

Nahla, A. A. and Zayed, E. M. E., 2010. “Solution of the nonlinear point nuclear reactor kinetics equations”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 52, pp. 743–746.

National Energy Software Center, 1985. “**Benchmark problem book**”. ANL-7416 Supplement 3, USA.

Orellana, E. T. V. and Barros, R. C., 2002. “Analytical Coarse-Mesh Method for Monoenergetic Slab-Geometry Reactor Kinetics using Neutron Diffusion Model”, **Journal of Neutron Research**, vol. 10, pp. 1–18.

Pollard, J. P., 1977. “AUS Diffusion Module POW checkout. 1-and-2-dimensional kinetics calculations”, **AAEC/387**.

Quintero-Leyva, B., 2010. “The multi-group integro-differential equations of the neutron diffusion kinetics. Solutions with the progressive polynomial approximation in multi-slab geometry”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 37, pp. 766–770.

Ravetto, P., Rostagno, M. M., Bianchini, G., Carta, M., and D’Angelo, A., 2004. “Application of the multipoint method to the kinetics of accelerator-driven systems”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 148, pp. 79–88.

Searcóid, M. ., 2007. “**Metric Spaces**”. Springer, USA.

Stacey, W. M., 1967. “**Modal Approximations: Theory and an Application to Reactor Physics**”. M.I.T Press, Massachusetts.

Sutton, T. M. and Aviles, B. N., 1996. “Diffusion theory methods for spatial kinetics calculations”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 30, pp. 119–182.