

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

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS VENENOS NO COMBUSTÍVEL NUCLEAR EM
CENÁRIOS COM DUAS ESCALAS DE TEMPO

por

Carlos Eduardo Espinosa

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia Mecânica

Porto Alegre, Dezembro de 2016

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DOS VENENOS NO COMBUSTÍVEL NUCLEAR EM
CENÁRIOS COM DUAS ESCALAS DE TEMPO

por

Carlos Eduardo Espinosa
Mestre em Matemática Aplicada

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 Mecânica

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann

Aprovada por:

Prof. Dr. Claudio Zen Petersen (UFPEL/RS)

Prof. Dr. Rubem Mário Figueiró Vargas (PUC/RS)

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha (PROMEC–UFRGS/RS)

Prof. Dr. Julio Cesar Lombaldo Fernandes (PROMEC–UFRGS/RS)

Prof. Dr. Jakson Manfredini Vassoler
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 15 de dezembro de 2016

AGRADECIMENTOS

Agradeço

A Deus por permitir-me dar mais um passo em minha vida profissional;

A meus pais Alberto e Livane, pelo amor incondicional, carinho e paciência que me deram não somente durante a realização desta tese, mas no decorrer de toda a minha vida;

Ao professor Bardo Ernst Josef Bodmann pela dedicação, paciência, confiança e amizade durante a orientação esta tese;

Ao professor Lucas da Silva Oliveira pela amizade, suporte e paciência durante a realização deste trabalho;

À banca, composta por Claudio Zen Petersen, Rubem Mário Figueiró Vargas, Luiz Alberto Oliveira Rocha e Julio Cesar Lombaldo Fernandes que aceitaram o convite que lhes foi feito e, dessa forma, colaboraram para conclusão deste trabalho;

A CAPES pelo apoio financeiro e ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes;

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

RESUMO

A presente discussão é uma extensão do modelo de cinética pontual de nêutrons, onde a reatividade é decomposta em termos de contribuição de curtas e longas escalas de tempo. A primeira representa o controle operacional do reator, enquanto a segunda é devido a alteração da composição química do combustível nuclear, como consequência do *burn-up*. É um primeiro passo em uma nova direção, uma vez que considera os efeitos dos principais venenos na cinética de nêutrons, ou seja, Xenônio-135 e Samário-149. O modelo proposto consiste em um sistema de equações não-lineares acoplado para a densidade de nêutrons, para os precursores de nêutrons atrasados e para as cadeias de decaimento dos venenos produtos de fissão. O sistema de equações é resolvido através de um método de decomposição, que expande os termos não-lineares em uma série infinita, obtendo um sistema recursivo, onde a inicialização da recursão é uma equação linear homogênea e os passos de recursão subsequentes consideram contribuições não-lineares como termo fonte construídos em passos de recursão anteriores. A construção hierárquica do modelo também é realizada, onde graus espaciais de liberdade são considerados. São apresentados casos de estudos com várias estruturas temporais a fim de mostrar a robustez da abordagem atual para este tipo de problema.

Palavras-chave: cinética de nêutrons, decomposição da reatividade, venenos de nêutrons.

ABSTRACT

The present discussion is an extension to Neutron point kinetics models, where the reactivity is decomposed in a short and a long term contribution. The first one represents operational reactor control, whereas the second one is due to the change of the chemical composition of the nuclear fuel as a consequence of burn-up. This is a first step into a new direction where we consider only the effects of the principal neutron poisons on neutron kinetics, i.e, Xenon-135 and Samarium-149. The proposed model consists in a system of coupled nonlinear equations for the neutron density, the delayed neutron precursors and the neutron poison decay chains. The equation system is solved using a decomposition method, which expands the non-linear terms in an infinite series, obtaining a recursive system, where the recursion initialization is a homogeneous linear equation and the subsequent recursion steps consider the non-linear contributions as source terms constructed from previous recursion steps. A hierarchical construction of the model is also performed, where spatial degrees of freedom are considered. We present case studies with severe time structure in order to show the robustness of the present approach for this kind of problems.

Keywords: neutron kinetic and space kinetic models, reactivity decomposition, neutron poisons.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	CONCEITOS SOBRE FÍSICA DE REATORES	6
2.1	Teoria de difusão de nêutrons	6
2.1.1	Equação multigrupo de energia	6
2.1.2	Cinética de reatores	8
2.1.3	Nêutrons atrasados	8
2.1.4	Seções de Choque	10
2.2	Venenos Produtos de Fissões	13
2.2.1	Produção e Remoção de Xenônio-135	13
2.2.2	Produção e Remoção de Samário-149	15
2.3	Ciclo do Combustível nuclear	16
3	CINÉTICA PONTUAL: MODELAGEM E METODOLOGIA APLICADA	18
3.1	Das equações de difusão até as equações de cinética considerando venenos	18
3.2	Modelo	27
3.3	Metodologia Aplicada	27
3.3.1	Cálculo dos polinômios de Adomian	31
4	RESULTADOS NUMÉRICOS: CINÉTICA PONTUAL	34
4.1	Caso A: Reatividade constante	34
4.2	Caso B: Reatividade dependente do tempo	39
4.3	Elementos de combustível reutilizados	50
4.4	Estabilidade do Algoritmo	61
5	CINÉTICA ESPACIAL	64
5.1	Metodologia Aplicada	65
5.1.1	Passo zero: Resolvendo o sistema linear	66

5.1.2	Recursões subsequentes: sistema linear com fonte	68
5.1.3	Polinômios de Adomian para o caso espacial	71
6	RESULTADOS NUMÉRICOS: CINÉTICA ESPACIAL	74
6.1	Reator com elementos de combustível novos	75
6.2	Reator com elementos reutilizados	87
6.3	Estabilidade do Algoritmo	92
7	CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS	94
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	96
	APÊNDICE A	98
	APÊNDICE B	101
	APÊNDICE C	105
	APÊNDICE D	114

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1	Produção anual, produção mensal e produção semanal de energia. Fonte: Bruno Burguer. Fraunhofer ISE. Data: EEX Tranparency Platform. . . .	2
Figura 2.1	Esquema multigrupo de energia.	6
Figura 2.2	Seção de choque de absorção neutrônica do Xe-135 em função da energia do nêutron incidente.	12
Figura 2.3	Seção de choque de absorção neutrônica do Sm-149 em função da energia do nêutron incidente.	12
Figura 2.4	Ciclo fechado do combustível nuclear.	17
Figura 4.1	Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$	35
Figura 4.2	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$	35
Figura 4.3	Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$	36
Figura 4.4	Concentração de Samário em função do tempo t em horas com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$	36
Figura 4.5	Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0005t$.	40
Figura 4.6	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0005t$	40
Figura 4.7	Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0005t$.	41
Figura 4.8	Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0005t$.	41
Figura 4.9	Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0005t$.	42
Figura 4.10	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0005t$	42
Figura 4.11	Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0005t$	43

Figura 4.12	Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0005t$	43
Figura 4.13	Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	44
Figura 4.14	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	45
Figura 4.15	Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	45
Figura 4.16	Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	46
Figura 4.17	$n(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$	47
Figura 4.18	$C(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$	47
Figura 4.19	$C_{Xe}(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$	48
Figura 4.20	$C_{Sm}(t)$ em função do tempo t em horas com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$	48
Figura 4.21	Densidade de nêutrons em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	50
Figura 4.22	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	51
Figura 4.23	Concentração de Xenônio em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	51
Figura 4.24	Concentração de Samário em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	52
Figura 4.25	Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	52
Figura 4.26	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	53

Figura 4.27	Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	53
Figura 4.28	Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	54
Figura 4.29	Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	54
Figura 4.30	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	55
Figura 4.31	Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	55
Figura 4.32	Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.	56
Figura 4.33	Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	56
Figura 4.34	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	57
Figura 4.35	Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	57
Figura 4.36	Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	58
Figura 4.37	$n(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	58
Figura 4.38	$C(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	59
Figura 4.39	$C_{Xe}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	59
Figura 4.40	$C_{Sm}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	60
Figura 6.1	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0.026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	75

Figura 6.2	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	76
Figura 6.3	Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	76
Figura 6.4	Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	77
Figura 6.5	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	77
Figura 6.6	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	78
Figura 6.7	Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	78
Figura 6.8	Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	79
Figura 6.9	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	79
Figura 6.10	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	80
Figura 6.11	Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	80
Figura 6.12	Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	81
Figura 6.13	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,023$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	82
Figura 6.14	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,023$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	82
Figura 6.15	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,024$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	83
Figura 6.16	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,024$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	83

Figura 6.17	Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	84
Figura 6.18	Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	84
Figura 6.19	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.	87
Figura 6.20	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.	88
Figura 6.21	Concentração dos precursores em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.	88
Figura 6.22	Concentração dos precursores em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.	89
Figura 6.23	Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.	89
Figura 6.24	Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.	90
Figura 6.25	Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.	90
Figura 6.26	Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.	91
Figura C.1	Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	105
Figura C.2	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	106
Figura C.3	Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	106
Figura C.4	Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$	107
Figura C.5	$n(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$	107

Figura C.6	$C(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$	108
Figura C.7	$C_{Xe}(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$	108
Figura C.8	$C_{Sm}(t)$ em função do tempo t em horas com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$	109
Figura C.9	Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	109
Figura C.10	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	110
Figura C.11	Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	110
Figura C.12	Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.	111
Figura C.13	$n(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	111
Figura C.14	$C(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	112
Figura C.15	$C_{Xe}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	112
Figura C.16	$C_{Sm}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.	113
Figura D.1	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	114
Figura D.2	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	115
Figura D.3	Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	115
Figura D.4	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	116
Figura D.5	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	116

Figura D.6	Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	117
Figura D.7	Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	117
Figura D.8	Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	118
Figura D.9	Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	118
Figura D.10	Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	119
Figura D.11	Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	119
Figura D.12	Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14}	120
Figura D.13	Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9	120
Figura D.14	Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5	121
Figura D.15	Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 após 720 horas de reator ligado.	121
Figura D.16	Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.	122
Figura D.17	Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.	122
Figura D.18	Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.	123

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Parâmetros nucleares dos precursores de nêutrons atrasados para o núcleo de Urânio-235	9
Tabela 4.1	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c > 0$	38
Tabela 4.2	Norma ℓ_∞ da diferença das aproximações sucessivas de n , C , C_I , C_{Xe} , C_{Pm} e C_{Sm}	63
Tabela 4.3	Norma ℓ_∞ das aproximações sucessivas de n , C , C_I , C_{Xe} , C_{Pm} e C_{Sm}	63
Tabela 6.1	ϕ , C , C_{Xe} e C_{Sm} com respeito ao número de termos da série.	86
Tabela 6.2	Normas ℓ_∞ de $\phi_k^j(x, t)$, $C_k^j(x, t)$, $(C_{Xe})_k^j(x, t)$ e $(C_{Sm})_k^j(x, t)$ como teste de estabilidade do método.	93
Tabela 6.3	Norma ℓ_∞ da diferença das aproximações sucessivas de $\phi_k^j(x, t)$, $C_k^j(x, t)$, $(C_{Xe})_k^j(x, t)$ e $(C_{Sm})_k^j(x, t)$ como teste de estabilidade do método.	93
Tabela B.1	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para a reatividade negativa.	101
Tabela B.2	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = 0.0005t$	101
Tabela B.3	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = -0.0005t$	102
Tabela B.4	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$	102
Tabela B.5	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$	103
Tabela B.6	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para a reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$	103
Tabela B.7	$n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para a reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$	104

LISTA DE ABREVIACES

ADS	Accelerator driven system
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
UFRJ	Universidade Federal do Rio de Janeiro
PUC	Pontfica Universidade Catlica
UFPel	Universidade Federal de Pelotas
PROMECC	Programa de Ps-Graduao em Engenharia Mecnica
RS	Rio Grande do Sul
CAPES	Coordenao de Aperfeioamento de Pessoal de Nvel Superior
I-135	Elemento Iodo-135
Pm-149	Elemento Promcio-149
Sm-149	Elemento Samrio-149
Xe-135	Elemento Xennio-135

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

A	Matriz de entradas constantes
A_j^i	Polinômios de Adomian do nuclídeo i na recursão j
B^2	“Buckling” material, [cm^{-2}]
C	Concentração de precursores de nêutrons atrasados, [cm^{-3}]
C_i	Concentração de precursores de nêutrons atrasados para o grupo i , [cm^{-3}]
C_I	Concentração de Iodo-135, [cm^{-3}]
C_{Xe}	Concentração de Xenônio-135, [cm^{-3}]
C_{Pm}	Concentração de Promécio-149, [cm^{-3}]
C_{Sm}	Concentração de Samário-149, [cm^{-3}]
D	Matriz diagonal dos autovalores
D	coeficiente de difusão de nêutrons, [cm]
f	Funções não lineares
F_j	Vetor fonte aproximado pelos polinômios de Adomian A_j
k_{eff}	Coeficiente de multiplicação efetivo
k_∞	Coeficiente de multiplicação infinito
n	Densidade de nêutrons, [cm^{-3}]
N	Matriz dependente do tempo da parte não linear
Q_{ext}	Fonte externa de nêutrons, [$cm^{-3} \times h^{-1}$]
t	Tempo, [h]
T	Período, [h]
v	Velocidade do nêutron, [cm/h]
\bar{v}	Velocidade média do nêutron, [cm/h]
U^{235}	Elemento Urânio 235
I^{135}	Elemento Iodo 135
Xe^{135}	Elemento Xenônio 135
Pm^{149}	Elemento Promécio 149
Sm^{149}	Elemento Samário 149
X	Matriz cujas colunas são autovetores da matriz A

1. Caracteres Arábicos (continuação)

\mathbf{X}^{-1} Matriz inversa dos autovetores

\mathbf{Y} Vetor solução do sistema

2. Caracteres Gregos

β	Fração de nêutrons atrasados
β_i	Fração de nêutrons atrasados do grupo i de precursores
γ_I	Produto de fissão do Iodo
γ_{Xe}	Produto de fissão do Xenônio
γ_{Pm}	Produto de fissão do Promécio
γ_{Sm}	Produto de fissão do Samário
Λ	Tempo médio de geração entre o nascimento do nêutron e posterior a absorção, [h]
λ	Constante de decaimento de nêutrons
λ_I	Constante de decaimento do Iodo
λ_{Xe}	Constante de decaimento do Xenônio
λ_{Pm}	Constante de decaimento do Promécio
λ_I	Constante de decaimento do Samário
ν	Número médio de nêutrons produzidos na fissão
ρ	Reatividade
ρ_c	Reatividade de escala de tempo curta
ρ_l	Reatividade de escala de tempo longa
Σ_a	Seção de choque macroscópica de absorção de nêutrons, [cm^{-1}]
Σ_f	Seção de choque macroscópica de fissão de nêutrons, [cm^{-1}]
Σ_s	Seção de choque macroscópica de espalhamento de nêutrons, [cm^{-1}]
σ_I	Seção de choque microscópica de absorção do elemento Iodo, [cm^2]
σ_{Xe}	Seção de choque microscópica de absorção do elemento Xenônio, [cm^2]
σ_{Pm}	Seção de choque microscópica de absorção do elemento Promécio, [cm^2]
σ_{Sm}	Seção de choque microscópica de fissão do elemento Samário, [cm^2]
ϕ	Fluxo escalar de nêutrons, [$cm^{-2} \times h^{-1}$]
χ_p	Espectro de fissão de nêutrons prontos
χ_d	Espectro de fissão de nêutrons atrasados

1 INTRODUÇÃO

Reatores nucleares desempenham um papel fundamental na definição da matriz energética nos países que utilizam esta fonte de energia. Pode-se separar a demanda de energia em duas partes: uma parte base que sempre existe e possui um perfil constante, e uma parte onde variações ocorrem de acordo com certos períodos onde a demanda cresce, como por exemplo, picos de energia em residências em certos períodos do dia, como na hora do almoço e na hora do jantar. Um estudo realizado pelo Instituto Fraunhofer Gesellschaft [Burguer, 2014] mostra em escalas de tempo diferenciadas para períodos longos e curtos de tempo a distribuição das fontes de energia. A Figura 1.1 mostra respectivamente, a produção de energia elétrica de um dia médio por mês ao longo do ano, a produção diária de energia durante um mês e a produção de energia diária durante uma semana. Independente das escalas, a utilização da energia nuclear, mesmo contendo algumas ondulações suaves, é praticamente constante. Nestes cenários, a cinética pontual que tipicamente é utilizada para estudos com escalas de tempo pequeno é menos relevante, no entanto o comportamento do combustível nuclear ao longo do tempo é de interesse.

Modelos de cinética pontual de nêutrons são usados para simular o comportamento transiente de reatores nucleares, relevantes para o controle do reator. Tipicamente, são considerados somente intervalos curtos de tempo, até $10^1 s$ (curta duração), enquanto que o presente trabalho visa analisar o comportamento do combustível durante a operação do reator, a longo prazo, na ordem de $10^4 s$, considerando efeitos dos venenos de nêutrons. Para esses tipos de modelos, a reatividade é decomposta em contribuições de curta e longa escala. A primeira representa o controle operacional do reator, enquanto que a segunda ocorre devido a variação da composição química do combustível nuclear como consequência da queima. Em escalas curtas de tempo, a composição química do combustível é praticamente constante [Rydin, 2003], pois nesse período de tempo a alteração não é tão significativa, e por isso pode-se utilizar seções de choque entre outros parâmetros nucleares como constantes.

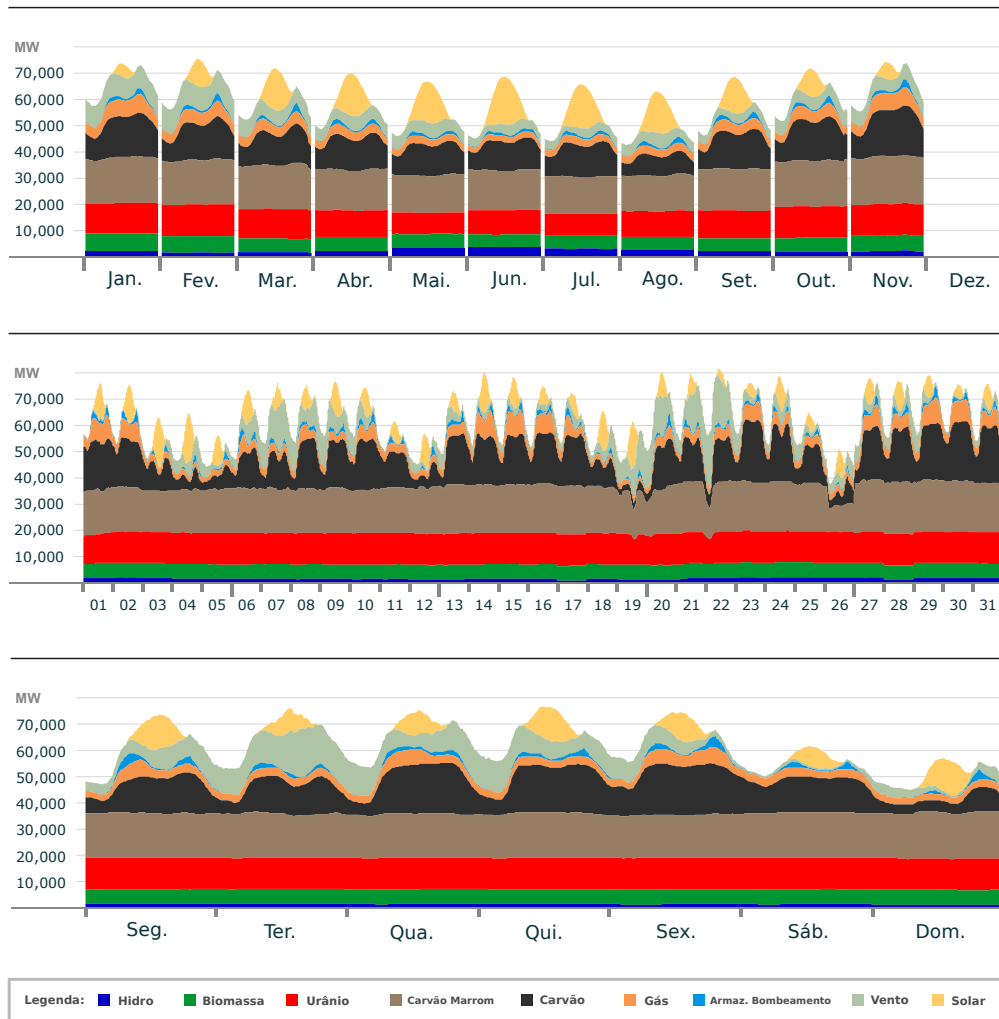


Figura 1.1: Produção anual, produção mensal e produção semanal de energia. Fonte: Bruno Burguer. Fraunhofer ISE. Data: EEX Transparency Platform.

Para escalas de tempo maiores, torna-se pertinente considerar presentes os chamados venenos de nêutrons. Venenos produtos de fissão surgem devido a fragmentos de fissões de nêutrons em reatores nucleares. Fissões nucleares geram fragmentos que decaem e geram produtos de fissão. Tais produtos são de extremo interesse no reator nuclear, pois se tornam absorvedores parasitários de nêutrons e resultam em longas fontes térmicas de calor [Cacuci, 2010]. Embora muitos produtos de fissão tenham seções de choque de absorção de nêutrons significantes, será dado enfoque em dois venenos que causam maior impacto no design e operação do reator: Xênonio-135 e Samário-149.

O combustível pode ser utilizado várias vezes como elemento reaproveitado, com o objetivo de tornar o fluxo mais achatado dentro do reator. Desta forma, em certas posições

são colocados alguns elementos mais antigos, geralmente até a terceira geração. Em Angra, os reatores possuem um ciclo de basicamente um ano, e após esse período os elementos não são descartados, sendo utilizados em ciclos subsequentes. É de extrema importância lembrar que para essa reutilização alguns venenos no combustível estão sempre presentes, como o elemento Samário-149 que é estável [DOE, 1993], [Cacuci, 2010]. Logo, quando se utiliza combustível antigo, é essencial saber qual a sua composição química. É importante salientar que a condição inicial imposta para os venenos Xenônio-135 e Samário-149 informam se a composição do combustível se dá apenas com elementos novos ou se elementos reutilizados são considerados.

O estudo de cinética de reatores de curta duração é considerado muito importante, pois através dele é possível prever o desempenho e avaliar a segurança de reatores nucleares de potência. No entanto, não será dado enfoque à cinética para escalas curtas de tempo. Para maiores informações sobre trabalhos que estudam cinética de curta duração, ver a literatura recente do assunto [Adams et al., 2002], [Buzano, 1995], [Zhangsheng et al., 2006], [Petersen, 2011], [Petersen et al., 2011] [Silva, 2011].

O modelo proposto neste trabalho consiste em um sistema de equações não-lineares acoplado para a densidade de nêutrons, para os precursores de nêutrons atrasados e para as cadeias de decaimento dos venenos com origem nos produtos de fissão. A reatividade é decomposta com respeito a duas escalas de tempo. A escala curta de tempo é associada ao modelo de cinética pontual tradicional enquanto a escala longa de tempo refere-se às propriedades relacionadas ao *burn-up*, isto é, devido aos efeitos dos venenos que provêm dos produtos de fissão. As principais questões abordadas nesta tese são, qual a influência da escala curta de tempo sobre o comportamento a longo prazo? A decomposição para o problema não-linear em duas escalas faz sentido? Como estas substâncias se comportam?

Para responder essas questões pertinentes, o sistema de equações é resolvido através de um método de decomposição [Adomian, 1988], [Adomian, 1994], que expande tanto as soluções para nêutrons, precursores e demais concentrações junto aos termos não-lineares (os chamados polinômios de Adomian) em uma série infinita, obtendo um sistema recursivo, na qual a inicialização da recursão é uma equação linear homogênea e os passos de recursão subsequentes consideram contribuições não-lineares como termo fonte construídos em passos de recursão anteriores. A construção hierárquica do modelo também é realizada,

onde graus espaciais de liberdade são considerados. São apresentados casos de estudos com várias estruturas temporais a fim de mostrar a robustez da abordagem atual para este tipo de problema.

O objetivo do trabalho é resolver o sistema de cinética de longa duração acoplado aos venenos produtos de fissão com reatividade constante e reatividade dependente do tempo para um grupo de precursores de nêutrons atrasados. Cumpre observar que escalas curtas e longas estão acopladas, um fato relevante para concepções inovadoras tais como ADS (Accelerator-driven system). Após isto, se estende o modelo utilizando a parte espacial, unidimensional em coordenadas cartesianas. Para resolver tal sistema, utiliza-se o método de decomposição de Adomian [Adomian, 1988], [Adomian, 1994].

O método da decomposição já foi utilizado com sucesso para o problema de cinética pontual [Petersen et al., 2011], [Silva, 2011]. Porém, nesses trabalhos o foco era na cinética pontual com escalas de tempo de curta duração, o que não é o foco deste trabalho. O presente trabalho e os trabalhos de Petersen et al., 2011 e Silva, 2011, têm seus sistemas considerados *stiff's*. No caso de cinética pontual, com 6 grupos de precursores, há no mínimo 5 ordens de grandezas diferentes nas escalas de tempo. No problema de cinética de longa duração, tem-se o mesmo fenômeno de rigidez, pois as cadeias de decaimento dos núclídeos possuem diferentes ordens de grandezas nas escalas de tempo.

No segundo capítulo abordam-se conceitos sobre o comportamento de reatores, entre eles, teoria de difusão de nêutrons, abrangendo a equação multigrupo de energia, nêutrons atrasados e ciclo do combustível nuclear. Também é apresentado um estudo sobre os venenos produtos de fissão. No capítulo três, derivam-se as equações de cinética considerando os venenos a partir da equação de difusão de nêutrons, apresenta-se o modelo de cinética pontual e seu método de resolução. No capítulo quatro apresentam-se resultados numéricos sobre o modelo estudado no capítulo anterior. No capítulo cinco formula-se o modelo de cinética espacial em coordenadas cartesianas e apresenta-se o seu método de resolução. No capítulo seis tem-se os resultados numéricos do modelo proposto do capítulo cinco bem como um estudo sobre a estabilidade do algoritmo. No capítulo sete, apresentam-se as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros. No Apêndice A, mostra-se o método clássico da decomposição de Adomian. No Apêndice B e C mostram-se resultados para o sistema de cinética pontual. No Apêndice D, mostram-se resultados para o sistema de cinética espacial.

Considera-se que os temas a serem abordados darão um passo em uma nova direção, a qual mostrará sua eficiência num contexto com tal complexidade.

2 CONCEITOS SOBRE FÍSICA DE REATORES

2.1 Teoria de difusão de nêutrons

2.1.1 Equação multigrupo de energia

Para chegar às equações multigrupo de energia aplica-se o conceito de balanço de nêutrons para um dado grupo de energia. Considera-se um típico grupo de energia g no qual nêutrons podem entrar ou sair deste grupo. Fisicamente, nêutrons perdem energia no processo migratório, por isso representam-se os índices em forma decrescente, como na Figura 2.1.

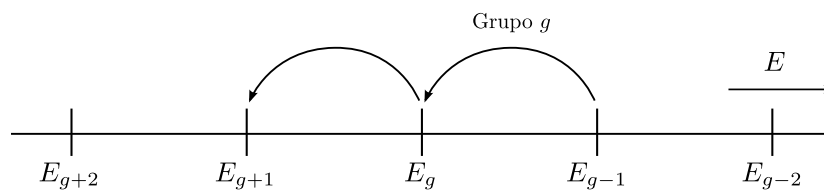


Figura 2.1: Esquema multigrupo de energia.

Na fissão, nêutrons nascem em grupos de alta energia e passam para grupos de energias menores, à medida que sofrem colisões com núcleos leves [Petersen, 2011]. O modelo monoenergético é um modelo simplificado, pois assume-se que todos os nêutrons possuem a mesma energia cinética que corresponde à energia média. Em um reator nuclear, as energias neutrônicas variam de 10MeV para menos do que 10^{-2}eV . Existem aproximadamente nove ordens de magnitude de variação na energia dos nêutrons segundo [Duderstadt e Hamilton, 1976], e para cálculos mais globais, precisa-se de um tratamento mais realístico da dependência da energia. Neste caso, discretiza-se o domínio energético em intervalos ou grupos, ao invés de tratar a energia E como variável contínua. Para cálculos gerais de reatores nucleares térmicos, utilizam-se dois grupos de energia: rápidos e térmicos. O grupo rápido de nêutrons é aquele em que sua energia vai de 1eV até 10MeV enquanto o grupo térmico diz respeito à energia cinética de zero até 1eV .

Através do balanço de energia [Reuss, 2008] chega-se às equações multigrupo de

energia da difusão de nêutrons:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, t) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ag}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t) + Q_g(\mathbf{r}, t) \\ &\quad - \Sigma_{sg}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.1)$$

para $g = 1 : G$, onde $\phi_g(\mathbf{r}, t)$ representa o fluxo escalar de nêutrons na posição \mathbf{r} do grupo g e no tempo t , v_g representa a velocidade de nêutrons no grupo g , $D_g(\mathbf{r}, t)$ representa o coeficiente de difusão na posição \mathbf{r} do grupo g e no tempo t , $\Sigma_{ag}(\mathbf{r}, t)$ representa a seção de choque macroscópica de absorção de nêutrons na posição \mathbf{r} do grupo g e no tempo t , $Q_g(\mathbf{r}, t)$ representa a fonte de nêutrons na posição \mathbf{r} do grupo g e no tempo t , $\Sigma_{sg}(\mathbf{r}, t)$ representa a seção de choque macroscópica de espalhamento de nêutrons na posição \mathbf{r} do grupo g para o grupo g e no tempo t , $\Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t)$ representa a seção de choque macroscópica de espalhamento de nêutrons na posição \mathbf{r} do grupo g' para o grupo g e no tempo t .

Pode-se separar o termo fonte de nêutrons $Q_g(\mathbf{r}, t)$ na soma de duas parcelas, uma devido a fonte externas e outra devido a fissões

$$Q_g(\mathbf{r}, t) = Q_g^{ext} + \chi_g \sum_{g' \neq g}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t), \quad (2.2)$$

onde χ_g representa a fração de nêutrons que aparece no grupo g , $\nu_{g'}$ representa o número médio de nêutrons emitidos na fissão do grupo g' , $\Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t)$ representa a seção de choque macroscópica de fissão de nêutrons na posição \mathbf{r} do grupo g' no tempo t , Q_g^{ext} representa a fonte externa de nêutrons e G representa o número de grupos de energia.

Considerando o modelo monoenergético (somente um grupo de energia) sem fonte externa, tem-se

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot D(\mathbf{r}, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t) + \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t), \quad (2.3)$$

onde $\phi(\mathbf{r}, t)$ representa o fluxo escalar de nêutrons na posição \mathbf{r} e no tempo t , v representa a velocidade de nêutrons, $D(\mathbf{r}, t)$ representa o coeficiente de difusão na posição \mathbf{r} no tempo t , $\Sigma_a(\mathbf{r}, t)$ representa a seção de choque macroscópica de absorção na posição \mathbf{r} e no tempo t ,

ν representa o número médio de nêutrons emitidos na fissão, $\Sigma_f(\mathbf{r}, t)$ representa a seção de choque macroscópica de fissão na posição \mathbf{r} e no tempo t .

2.1.2 Cinética de reatores

O estado crítico de um reator ocorre quando a taxa de produção via fissão de nêutrons é balanceada pela perda via absorção ou fuga de nêutrons, o que equivale dizer que a densidade de nêutrons ou o fluxo não depende do tempo. Qualquer dependência temporal da população de nêutrons, através da alteração da condição de balanço, resultará em uma variação temporal da potência do reator. Tal condição dá origem ao que é chamado de Cinética do reator, que é o estudo do reator quando densidade ou fluxo variam com o tempo [Petersen, 2011].

Na maioria das vezes, mudanças no comportamento da população de nêutrons não estão sob o controle direto do operador do reator. Em alguns casos, depende da composição do núcleo, que por sua vez depende de outras variáveis como venenos produtos de fissão ou a temperatura do combustível. Tais variáveis são função do fluxo de nêutrons e do nível de potência do reator. O estudo dessas causas intrínsecas do comportamento da população de nêutrons é chamado de dinâmica de reator nuclear.

Nesta tese, dá-se ênfase no primeiro passo à cinética de reator nuclear, e num segundo passo às variações do fluxo de nêutrons devido a venenos produtos de fissão para escalas de tempo de longa duração, ou seja, o afastamento da criticalidade devido a influências de venenos alterando parâmetros nucleares para uma escala de tempo maior.

2.1.3 Nêutrons atrasados

A fissão nuclear dá origem a vários fragmentos dentre eles elementos com menor número de massa do que o núcleo original [Petersen, 2011]. A maioria desses fragmentos são instáveis e alguns desses emitem nêutrons nos processos de decaimento. Os nêutrons emitidos após o processo da fissão são chamados de nêutrons atrasados e os núcleos que os emitem são chamados de precursores de nêutrons atrasados.

Nêutrons atrasados possuem propriedades diferentes dos nêutrons produzidos diretamente da fissão (nêutrons prontos). Uma delas é que a energia média dos nêutrons prontos, em torno de $2MeV$, é muito maior que a energia média dos nêutrons atrasados, que está

em torno de $0,5MeV$ [Stacey, 1967]. Nêutrons atrasados “nascem” com energias mais baixas do que nêutrons prontos o que gera dois impactos significantes no ciclo de vida do nêutron. Primeiro, os nêutrons atrasados possuem energia média abaixo do mínimo requerido para a ocorrência da fissão rápida, logo eles têm uma probabilidade muito menor de causar fissões rápidas comparado aos nêutrons prontos. Segundo, por “nascer” com energias mais baixas os nêutrons atrasados têm uma probabilidade menor de fuga do núcleo, logo, viajam distâncias mais curtas do que nêutrons rápidos. Outra característica é que tais nêutrons chegam mais rápido a energias térmicas onde as probabilidades para induzir fissão são maiores [Hetrick, 1971].

Usualmente, são utilizados 6 grupos de nêutrons atrasados, classificados de acordo com sua meia-vida. A Tabela abaixo [Reuss, 2008] mostra a fração de nêutrons atrasados para cada grupo no combustível Urânio-235.

Tabela 2.1: Parâmetros nucleares dos precursores de nêutrons atrasados para o núcleo de Urânio-235

Grupo	U_{235}	$\lambda_i[s^{-1}]$	Fração
1		0,0124	0,00022
2		0,0305	0,00142
3		0,1110	0,00127
4		0,3100	0,00257
5		1,1400	0,00075
6		3,0100	0,00027

Temos que $\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i$, logo, para 6 grupos de precursores de U_{235} , $\beta = 0,0065$. Portanto, nêutrons atrasados correspondem a 0,65% dos nêutrons produzidos pela fissão do elemento U_{235} . Para encontrarmos equações que descrevam a dependência temporal da concentração dos precursores de nêutrons atrasados é necessário avaliar os mecanismos de perda e ganho dos precursores, possibilitando assim a construção de uma equação de balanço.

A variação temporal da concentração dos precursores é dada pela produção do precursor através da fissão e pela perda causada pelo decaimento posterior. Portanto, a equação de balanço que representa a concentração de precursores é dada como

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(\mathbf{r}, t) = \beta_i \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \quad (2.4)$$

onde $i = 1 : 6$. Logo, a equação de balanço para a concentração de precursores e a equação de cinética espacial monoenergética são descritas como [Duderstadt e Hamilton, 1976]

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, t) &= [D\nabla^2 - \Sigma_a + (1 - \beta)\nu\Sigma_f] \phi(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{r}, t) &= \beta\nu\Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) - \lambda C(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.5)$$

Para o modelo multigrupo de energia, tem-se [Duderstadt e Hamilton, 1976]

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) &= \sum_{g'=1}^G (\Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta)\chi_g^p \nu \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t)) \phi_g(\mathbf{r}, t) + \\ &\quad \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, t) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ag}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t) + \chi_g^d \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \\ &\quad \vdots \\ \frac{\partial}{\partial t} C_i(\mathbf{r}, t) &= \sum \beta_i \nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(\mathbf{r}, t) + \beta_i \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.6)$$

para $i = 1 : 6$ e $g = 1 : G$.

2.1.4 Seções de Choque

A probabilidade de um nêutron interagir com um núcleo em uma reação particular é dependente não só do tipo de núcleo envolvido, mas também da energia do nêutron [Reuss, 2008]. Assim, a absorção de um nêutron térmico na maior parte dos materiais é muito mais provável que a absorção de um nêutron rápido. Além disso, a probabilidade de interação irá variar dependendo do tipo de reação envolvida.

Uma medida para a probabilidade de uma dada reação ocorrer entre um nêutron e um núcleo é chamada de seção de choque microscópica (σ) do núcleo para a reação envolvida. Esta seção de choque em geral varia com a energia do nêutron. Como a seção de choque microscópica é uma área, sua unidade é expressa em centímetros quadrados (cm^2). Um centímetro quadrado é de fato muito grande em comparação com a área efetiva de um

núcleo, logo, é representado convenientemente em *barns* que é

$$1\text{barn} = 10^{-24}\text{cm}^2.$$

Os elementos Xenônio-135 e Samário-149 apresentam altas seções de choque de absorção de nêutrons e somente afetam sistemas de reatores térmicos. Para nêutrons de energias mais altas (rápidos), a seção de choque de absorção decresce a medida que a energia de nêutrons aumenta. Esta é chamada região de nêutrons rápidos. Nesta região a seção de choque de absorção é geralmente menor do que 10barns .

Nas Figuras 2.2 e 2.3 mostra-se o comportamento da seção de choque de absorção neutrônica do Xenônio e do Samário em função da energia incidente. Nota-se que existem variações com no mínimo 6 ordens de grandeza tanto para a seção de choque, dada em *barns*, quanto para energia incidente. Significa que nêutrons rápidos praticamente não realizam nenhuma contribuição, e com isso somente os nêutrons térmicos exercem influência nos venenos.

Na Figura 2.3 nota-se que existem algumas ressonâncias, as quais ocorrem em níveis intermediários de energia. A tendência no gráfico é que σ decresça, e assim, pode-se ver que a grande contribuição se dá nas energias mais baixas. Em energias baixas de nêutrons ($< 1\text{eV}$), a seção de choque é inversamente proporcional à velocidade do nêutron. Novamente, nêutrons rápidos praticamente não existem em energias onde a absorção da ressonância é significativa.

A probabilidade de uma dada reação ocorrer por unidade de deslocamento de nêutron é definida como seção de choque macroscópica (Σ) e está relacionada com a seção de choque microscópica pela seguinte relação

$$\Sigma = \sigma C, \tag{2.7}$$

onde C é a densidade atômica do material.

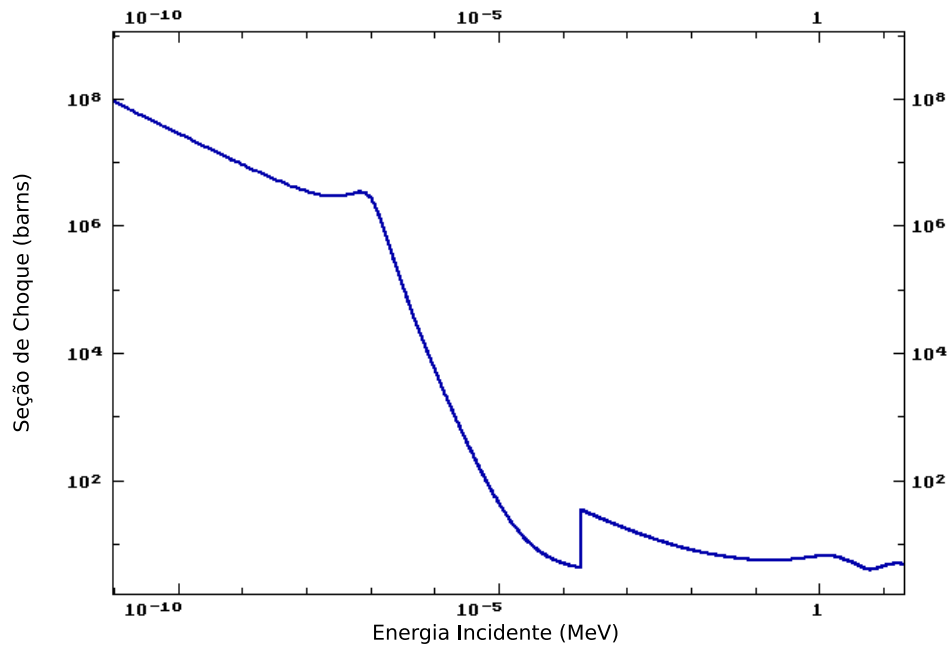


Figura 2.2: Seção de choque de absorção neutrônica do Xe-135 em função da energia do nêutron incidente.

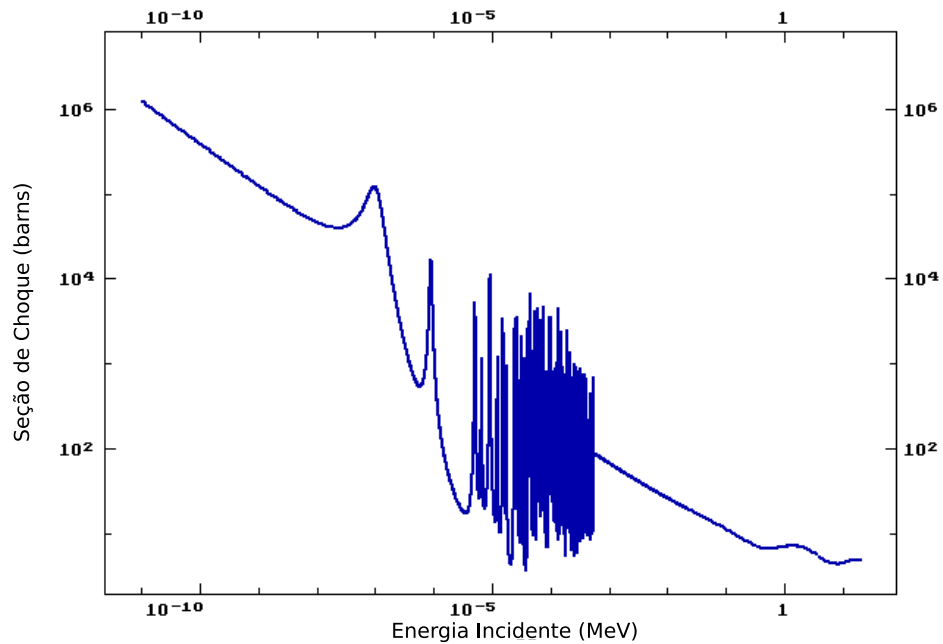


Figura 2.3: Seção de choque de absorção neutrônica do Sm-149 em função da energia do nêutron incidente.

A maior parte dos materiais são compostos de vários elementos, e como a maioria dos elementos são compostos de vários isótopos, a maioria dos materiais envolvem muitas seções de choque, uma para cada isótopo envolvido [Sekimoto, 2007]. Portanto, para incluir todos os isótopos contidos em um dado material, é necessário determinar a seção de choque macroscópica para cada isótopo e depois somar todas as seções de choques individuais. Para determinar uma seção de choque macroscópica composta de vários materiais, calcula-se

$$\Sigma = \sigma_1 C_1 + \sigma_2 C_2 + \dots + \sigma_n C_n, \quad (2.8)$$

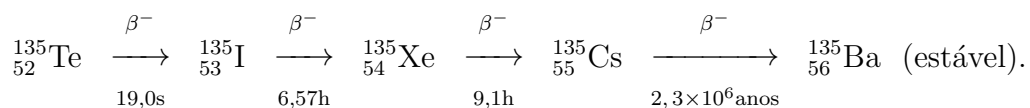
onde C_n é a densidade do n -ésimo elemento e σ_n é a seção de choque microscópica do n -ésimo elemento.

2.2 Venenos Produtos de Fissões

Fissões nucleares geram fragmentos de fissão, que por sua vez decaem e produzem produtos de fissão. Produtos de fissão são de extremo interesse no reator nuclear, uma vez que eles se tornam absorvedores parasitários de nêutrons e resultam em longas fontes térmicas de calor. Embora muitos produtos de fissão tenham seções de choque de absorção de nêutrons significantes, é dado enfoque em dois venenos que causam mais impacto na configuração e operação do reator: Xenônio-135 e Samário-149. Tais venenos removem nêutrons do reator, o que gera um impacto no fator de utilização térmica e portanto no k_{eff} [Reuss, 2008].

2.2.1 Produção e Remoção de Xenônio-135

Xenônio-135 tem uma seção de choque de absorção de nêutrons de $2,6 \times 10^6$ barns. É produzido diretamente por algumas fissões, mas é mais comumente um produto do decaimento do Telúrio-135 como na cadeia de decaimento a seguir



Como a meia vida do Telúrio-135 é pequena comparada as outras meias-vidas, pode-se assumir de forma simplificada que Iodo é produzido diretamente de fissão. Iodo-135 não é

um absorvedor de nêutrons forte, porém ele decai para formar o veneno de nêutrons Xenônio-135. Cerca de 95% de todo o Xenônio produzido vem do decaimento do Iodo-135. Portanto, a meia-vida do Iodo-135 desempenha um papel importante na quantidade de Xenônio presente. A taxa de variação da concentração de Iodo é dada como

$$\text{Variação de } I^{135} = \text{produção por fissão} - \text{decaimento de } I^{135} - \text{Queima de } I^{135},$$

que equivale a

$$\frac{dC_I(t)}{dt} = \gamma_I \Sigma_f v n(t) - \lambda_I C_I(t) - \sigma_I C_I(t) v n(t), \quad (2.9)$$

onde C_I é a concentração de Iodo-135, γ_I é a produção pela fissão de Iodo-135, Σ_f é a seção de choque macroscópica da fissão, $n(t)$ é a densidade de nêutrons, λ_I é a constante de decaimento de Iodo-135, v é a velocidade do nêutron e σ_I é a seção de choque microscópica de absorção do Iodo-135.

Podemos assumir que σ_I é muito pequeno [DOE, 1993], logo, o termo da taxa de queima pode ser ignorado, e assim temos

$$\frac{dC_I(t)}{dt} = \gamma_I \Sigma_f v n(t) - \lambda_I C_I(t). \quad (2.10)$$

A taxa de variação da concentração de Xenônio-135 é dada como

$$\begin{aligned} \text{Variação de } Xe^{135} = & \text{produção por fissão} + \text{decaimento de } I^{135} - \text{Queima de } Xe^{135} \\ & - \text{decaimento de } Xe^{135}, \end{aligned}$$

que equivale a

$$\frac{dC_{Xe}(t)}{dt} = \gamma_{Xe} \Sigma_f v n(t) + \lambda_I C_I(t) - \lambda_{Xe} C_{Xe}(t) - \sigma_{Xe} C_{Xe}(t) v n(t), \quad (2.11)$$

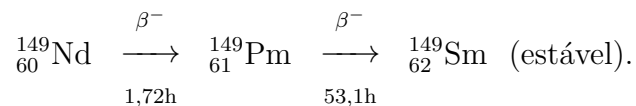
onde C_{Xe} é a concentração de Xenônio-135, C_I é a concentração de Iodo-135, γ_{Xe} é a produção pela fissão de Xenônio-135, Σ_f é a seção de choque macroscópica da fissão, n é a densidade

de nêutrons, λ_I é a constante de decaimento de Iodo-135, λ_{Xe} é a constante de decaimento de Xenônio-135 e σ_I é a seção de choque microscópica de absorção do Xenônio-135.

O termo de queima de Xenônio-135 gera Xenônio-136, o qual não é um absorvedor significativo. Após um decrescimento da potência, a concentração de Xenônio-135 inicialmente aumentará devido a produção pelo decaimento de Iodo ser maior do que a queima. Xenônio-135 alcançará um pico máximo aproximadamente 8 a 10 horas após a diminuição da potência e, decrescerá para um menor valor de equilíbrio. Xenônio é removido do núcleo por decaimento radioativo e pela absorção de nêutron durante a operação do reator.

2.2.2 Produção e Remoção de Samário-149

Samário-149 comporta-se diferente de Xenônio-135 devido suas propriedades nucleares. É o segundo mais importante veneno produto de fissão, pois tem alta seção de choque de absorção de nêutrons térmicos (aproximadamente $4,1 \times 10^4$ barns). Samário-149 é produzido pelo decaimento do fragmento de fissão do Neodímio-149 conforme o decaimento da cadeia abaixo



Com o objetivo de analisar o comportamento de Samário-149, nota-se que a meia vida do Neodímio-149 é de 1,72 horas, que é suficientemente mais curto do que 53,1 horas da meia vida do Promécio-149. Portanto, pode-se considerar que o Promécio-149 seja formado diretamente a partir da fissão. Negligenciando ainda a pequena quantidade de queima de Promécio-149, a taxa de variação da concentração de Promécio-149 é dada como

$$\frac{dC_{Pm}(t)}{dt} = \gamma_{Pm}\Sigma_f v n(t) - \lambda_{Pm}C_{Pm}(t), \quad (2.12)$$

onde C_{Pm} é a concentração de Promécio-149, γ_{Pm} é a produção pela fissão de Promécio-149, Σ_f é a seção de choque macroscópica de fissão, n é a densidade de nêutrons térmicos e λ_{Pm} é a constante de decaimento de Promécio-149.

A taxa de variação da concentração de Samário-149 é dada como

$$\text{Variação de } Sm^{149} = \text{produção por fissão} + \text{decaimento de } Pm^{149} - \text{Queima de } Sm^{149}$$

ou seja,

$$\frac{dC_{Sm}(t)}{dt} = \gamma_{Sm}\Sigma_f v n(t) + \lambda_{Pm}C_{Pm}(t) - \sigma_{Sm}C_{Sm}(t)v n(t), \quad (2.13)$$

onde C_{Sm} é a concentração de Samário-149, γ_{Sm} é a produção pela fissão de Samário-149, Σ_f é a seção de choque macroscópica de fissão, n é a densidade de nêutrons, λ_{Pm} é a constante de decaimento de Promécio-149 e σ_a^{Sm} é a seção de choque microscópica de absorção do Samário-149.

A produção através da fissão de Samário-149 é próxima de zero DOE [1993], logo

$$\frac{dC_{Sm}(t)}{dt} = \lambda_{Pm}C_{Pm}(t) - \sigma_{Sm}C_{Sm}(t)v n(t). \quad (2.14)$$

2.3 Ciclo do Combustível nuclear

Após o combustível ter chegado ao fim da sua vida útil e ser retirado de um reator, pode ainda ser processado de modo que a maioria seja reciclada para o novo combustível [Agency, 2002]. As várias atividades associadas à produção de energia a partir de reações nucleares são referidas coletivamente como o ciclo do combustível nuclear, conforme Figura 2.4. Esse ciclo começa com a mineração de urânio e termina com a eliminação dos resíduos nucleares. É chamado de ciclo fechado o ciclo que admite o reprocessamento de combustível usado e posterior reutilização do material recuperado.

Depois que o urânio gastou cerca de três anos em um reator para produzir energia nuclear, o combustível utilizado pode sofrer uma nova série de etapas, incluindo o armazenamento temporário, reprocessamento e reciclagem antes dos resíduos serem eliminados. É utilizado em países como Bélgica, Inglaterra, Japão e França. Não é amplamente utilizado devido ao custo do processo, em comparação ao preço do urânio.

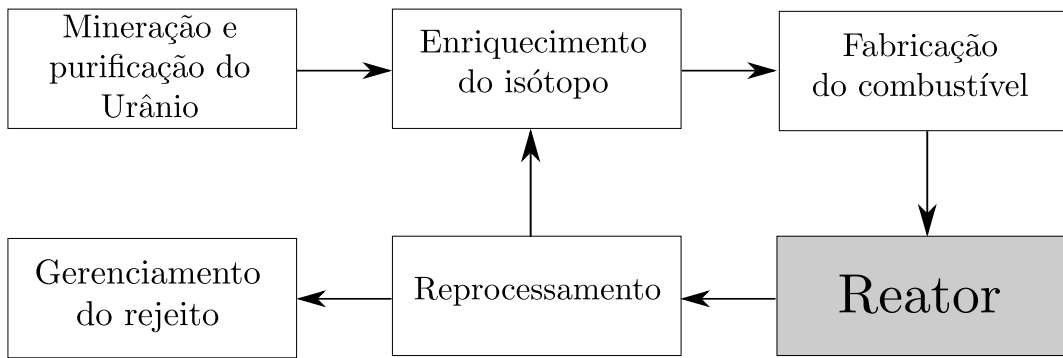


Figura 2.4: Ciclo fechado do combustível nuclear.

Para manter o desempenho eficiente do reator, devido a fragmentos de fissão, já não é prático continuar a utilizar o combustível. Logo, cerca de um terço do combustível gasto é retirado a cada 12 ou 18 meses, para ser substituído com combustível novo. No caso da cinética de longa duração, analisa-se a escala de tempo até o ciclo. No Brasil trabalha-se com um ciclo de cerca de um ano, enquanto existem ciclos de até três anos.

3 CINÉTICA PONTUAL: MODELAGEM E METODOLOGIA APLICADA

No presente capítulo, faz-se um estudo da dedução formal das Equações de Cinética Pontual, para o caso de 1 grupo de precursores de nêutrons atrasados e a Equação da Difusão de Nêutrons para cálculo do fluxo de nêutrons. O modelo das equações de cinética com efeitos dos venenos é proposto e sua solução é encontrada através da metodologia aplicada neste capítulo, fazendo uso do método da decomposição de Adomian.

3.1 Das equações de difusão até as equações de cinética considerando venenos

Para esta seção, foram utilizados estudos e materiais de aula do professor Fernando Carvalho da Silva (COPPE/UFRJ). Se o sistema operou de $t = 0$ até $t = t_0$ no estado estacionário, então, o fluxo de nêutrons em $t = t_0$ é dado pela seguinte equação:

$$\begin{aligned} & - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t_0)) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) \phi(\mathbf{r}, E, t_0) \\ & = \int_0^\infty \{ \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0) \} \phi(\mathbf{r}, E', t_0) dE', \end{aligned} \quad (3.1)$$

onde

$$D(\mathbf{r}, E, t_0) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t_0)}, \quad (3.2)$$

$$\Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) = \Sigma_c(\mathbf{r}, E, t_0) + \Sigma_f(\mathbf{r}, E, t_0) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E, t_0) \quad (3.3)$$

e

$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E, t_0) = \sum_{i=1}^I C_i(\mathbf{r}, t_0) \sigma_x^i(E), \quad (3.4)$$

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

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

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, E, t) - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t)) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \phi(\mathbf{r}, E, t) \\ &= \int_0^\infty \left\{ \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \right\} \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\ &+ \lambda \chi_p(E) C(\mathbf{r}, t) - \int_0^\infty \beta \chi_d(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \end{aligned} \quad (3.5)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial t} C(\mathbf{r}, t) = \beta \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' - \lambda C(\mathbf{r}, t), \quad (3.6)$$

com

$$\chi(E) = (1 - \beta) \chi_p(E) + \beta \chi_d(E) \quad (3.7)$$

e

$$\Sigma_x(\mathbf{r}, E, t) = \sum_{i=1}^I C_i(\mathbf{r}, t) \sigma_x^i, \quad (3.8)$$

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

$$\Sigma_s = \Sigma_s(\mathbf{r}, E \rightarrow E', t). \quad (3.9)$$

Para deduzir as Equações de Cinética Pontual, é necessário conhecer o fluxo adjunto de nêutrons em $t = t_0$, ou seja, a equação adjunta da Equação (3.1) [Duderstadt e Hamilton,

1976]. A equação que governa este fluxo adjunto ($\phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)$) é da seguinte forma:

$$\begin{aligned} & - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \\ & = \int_0^\infty \{ \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0) \} \phi^*(\mathbf{r}, E', t_0) dE', \end{aligned} \quad (3.10)$$

Multiplicando a Equação (3.5) por $\phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)$ e a Equação (3.10) por $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ e integrando as equações resultantes no volume (V) do sistema e em energia, tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{1}{v(E)} \phi(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r \right) \\ & - \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t)) dE d^3r \\ & + \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \phi(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r \\ & = \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \left(\int_0^\infty \{ \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) + \Sigma_s \} \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE d^3r \\ & - \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \left(\int_0^\infty \beta \chi_d(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE d^3r \\ & + \lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \chi_d(E) C(\mathbf{r}, t) dE d^3r \end{aligned} \quad (3.11)$$

e

$$\begin{aligned} & - \int_V \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)) dE d^3r \\ & + \int_V \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) dE d^3r \\ & = \int_V \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \left(\int_0^\infty \{ \chi(E') \nu(E) \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0) + \Sigma_s \} \phi^*(\mathbf{r}, E', t_0) dE' \right) dE d^3r. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Subtraindo a Equação (3.12) da Equação (3.11) e fazendo uso de condições de contorno em que tanto o fluxo de nêutrons quanto o fluxo adjunto são nulos na superfície do

sistema, em qualquer instante, tem-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \left(\int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{1}{v(E)} \phi(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r \right) \\
&= \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \left(\int_0^\infty \{ \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) + \delta \Sigma_s \} \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right. \\
&+ \left. \nabla \cdot (\delta D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t)) - \delta \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \phi(\mathbf{r}, E, t) \right) dE d^3r \quad (3.13) \\
&- \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \left(\int_0^\infty \beta \chi_d(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE d^3r \\
&+ \lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \chi_d(E) C(\mathbf{r}, t) dE d^3r,
\end{aligned}$$

onde

$$\delta D(\mathbf{r}, E, t) \equiv D(\mathbf{r}, E, t) - D(\mathbf{r}, E, t_0) \quad (3.14)$$

e

$$\delta \Sigma_x(\mathbf{r}, E, t) \equiv \Sigma_x(\mathbf{r}, E, t) - \Sigma_x(\mathbf{r}, E, t_0) = \sum_{i=1}^I \{ C_i(\mathbf{r}, t) - C_i(\mathbf{r}, t_0) \} \sigma_x^i(E). \quad (3.15)$$

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

$$\begin{aligned}
\phi(\mathbf{r}, E, t) &\cong f(\mathbf{r}, E) n(t) \\
C(\mathbf{r}, E, t) &\cong f(\mathbf{r}, E) C(t)
\end{aligned} \quad (3.16)$$

Com isso, da Equação (3.13), tem-se que

$$\frac{d}{dt} n(t) = \frac{\rho(t) - \bar{\beta}(t)}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t), \quad (3.17)$$

onde Λ é o tempo médio de geração entre o nascimento do nêutron e a subsequente absorção induzindo fissão e ρ é definida como a reatividade, a qual é uma grandeza adimensional e pode assumir três estados, supercrítico ($\rho(t) > 0$), subcrítico ($\rho(t) < 0$) e crítico ($\rho(t) = 0$). Na criticalidade ($\rho = 0$) a reação em cadeia é auto-sustentável, isto é, a população de nêutrons

nem aumenta nem decresce. São dados respectivamente, por

$$A \equiv \frac{1}{F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(\mathbf{r}, E) dE d^3r \quad (3.18)$$

e

$$\begin{aligned} \rho(t) \equiv & \frac{1}{F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \left(\int_0^\infty \{ \chi(E) \nu(E') \delta \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \right. \\ & + \delta \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \} f(\mathbf{r}, E') dE' + \nabla \cdot [\delta D(\mathbf{r}, E, t) \nabla f(\mathbf{r}, E)] \\ & \left. - \delta \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) f(\mathbf{r}, E) \right) dE d^3r. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Define-se

$$\bar{\beta}(t) \equiv \frac{\beta}{F} \int_V \left[\int_0^\infty \chi_d(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) dE \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) f(\mathbf{r}, E') dE' \right] d^3r \quad (3.20)$$

e

$$C(t) \equiv \frac{1}{\Lambda F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \chi_d(E) C(\mathbf{r}, t) dE d^3r, \quad (3.21)$$

com

$$F \equiv \int_V \left[\int_0^\infty \chi(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) dE \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0) f(\mathbf{r}, E') dE' \right] d^3r. \quad (3.22)$$

Com o objetivo de obter a equação para a densidade de nêutrons com a influência dos venenos produtos de fissão, os quais encontram-se na reatividade, faz-se suposições na Equação (3.19):

- Fissão: O termo de queima de combustível é desconsiderado, uma vez que a variação é de ordem de grandeza menor.
- Espalhamento: O termo de espalhamento não possui relevância, pois como a alteração na composição química do combustível é pequena, maior parte do espalhamento é feito na água e não no próprio combustível.

- Difusão: O termo de difusão é praticamente um terço da seção de choque de transporte (Equação (3.2)), dessa forma, pode-se supor constante.

Considera-se apenas o efeito de captura de Xenônio e Samário, então, da Equação (3.3) tem-se

$$\Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) = \Sigma_c(\mathbf{r}, E, t_0) = \Sigma_a(\mathbf{r}, E, t_0), \quad (3.23)$$

onde

$$\Sigma_a(\mathbf{r}, E, t_0) = \Sigma_a^{Xe}(\mathbf{r}, E, t_0) + \Sigma_a^{Sm}(\mathbf{r}, E, t_0) = \sigma_a^{Xe} C_{Xe} + \sigma_a^{Sm} C_{Sm}. \quad (3.24)$$

Cabe de ressaltar que para a captura existem escalas de tempo diferentes, de longa e de curta duração. A absorção de curta duração diz respeito ao controle do reator, e envolve as varetas de controle, as quais possuem escalas em torno de $10^{-5}s$. Ao considerar os venenos, nota-se que existem escalas que não fazem sentido serem curtas, isto é, tem-se escalas maiores devido aos decaimentos, que são em torno de 10^4s ou mais. Entre esse e outros fatores, escolhe-se a escala de tempo dada em horas.

Devido a diferença de escala de tempo (curta e longa), pode-se decompor a reatividade na forma

$$\rho(t) = \rho_c(t) + \rho_l(t), \quad (3.25)$$

onde ρ_c refere-se a escala de tempo curta (varetas de controle ou mais genericamente operação do reator) e ρ_l refere-se a escala longa de tempo (captura dos venenos, ou seja, efeitos intrínsecos do reator).

Portanto, a equação da reatividade torna-se:

$$\begin{aligned} \rho(t) &\equiv \rho_c(t) \\ &+ \frac{1}{F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) [-\delta \Sigma_a^{Xe}(\mathbf{r}, E, t_0) - \delta \Sigma_a^{Sm}(\mathbf{r}, E, t_0)] dE d^3r, \end{aligned} \quad (3.26)$$

ou seja,

$$\rho_l(t) = \frac{1}{F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) [-\delta\Sigma_a^{Xe}(\mathbf{r}, E, t_0) - \delta\Sigma_a^{Sm}(\mathbf{r}, E, t_0)] dE d^3r. \quad (3.27)$$

Pela Equação (3.18),

$$\frac{1}{F} \equiv \frac{\Lambda}{\int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(\mathbf{r}, E) dE d^3r}. \quad (3.28)$$

Portanto, ao substituir a Equação (3.28) na Equação (3.26), e após substituir o resultado na Equação (3.17), tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n(t) &= \frac{\rho_c(t) - \bar{\beta}(t)}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) \\ &+ \frac{\Lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) [-\delta\Sigma_a^{Xe}(\mathbf{r}, E, t_0) - \delta\Sigma_a^{Sm}(\mathbf{r}, E, t_0)] dE d^3r}{\Lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(\mathbf{r}, E) dE d^3r} n(t). \end{aligned} \quad (3.29)$$

Nota-se que Λ existe apenas para escala curta de tempo, ou seja, em $\rho_l(t)$ não existe mais (os termos Λ anulam-se em ρ_l). Outro fato importante de salientar é que para escalas de tempo longas há contribuição da velocidade. A integral permanece e isso nada mais é do que um valor esperado para a velocidade. Desmembrando, tem-se as seções de choque efetivas. Então, observa-se que as concentrações isotópicas dos diferentes núclídeos $C_i(\mathbf{r}, t)$, incluindo Xenônio e Samário, estão na reatividade, em $\rho_l(t)$, através do termo $\delta\Sigma_a(t)$ devido as equações (3.15) e (3.19). Define-se

$$\bar{v} = \frac{1}{\int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{1}{v(E)} f(\mathbf{r}, E) dE d^3r}, \quad (3.30)$$

onde \bar{v} é denominada velocidade efetiva. Portanto, após separar as escalas de tempo na reatividade e identificar as seções de choque a serem consideradas (captura dos venenos), a equação do modelo para a densidade de nêutrons considerando venenos produtos de fissão é

dada por:

$$\frac{d}{dt}n(t) = \frac{\rho_c(t) - \bar{\beta}}{\Lambda}n(t) + \lambda C(t) - [\sigma_{Xe}C_{Xe}(t) + \sigma_{Sm}C_{Sm}(t)]\bar{v}n(t). \quad (3.31)$$

Para obter a equação para a concentração de precursores $C(t)$, multiplica-se a Equação (3.6) por $\phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)\chi_d(E)$, integra-se a equação resultante em V e em E e utiliza-se a Equação (3.16), o que resulta em

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\int_V \int_0^\infty \chi_d(E)\phi^*(\vec{r}, E, t_0)C(\vec{r}, t)dEd^3r \right) \\ &= \beta \int_V \left\{ \int_0^\infty \chi_d(E)\phi^*(\vec{r}, E, t_0)dE \right\} \{ \nu(E')\Sigma_f(\vec{r}, E', t)f(\vec{r}, E')dE \} d^3rn(t) \\ &- \lambda \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0)\chi_d(E)C(\vec{r}, t)dEd^3r. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Dividindo esta última equação por ΛF e fazendo uso das definições dadas pelas Equações (3.20) e (3.21), segue que

$$\frac{d}{dt}C(t) = \frac{\bar{\beta}(t)}{\Lambda}n(t) - \lambda C(t). \quad (3.33)$$

Para o caso monoenergético, tem-se que $\phi^*(\mathbf{r}, t_0)$ é o próprio $\phi(\mathbf{r}, t_0)$. Os parâmetros cinéticos Λ , $\bar{\beta}$ e $\rho(t)$ passam a ser dados por

$$\Lambda = \frac{1}{F} \int_V \phi(\mathbf{r}, t_0) \frac{1}{v} \phi(\mathbf{r}, t_0) d^3r, \quad (3.34)$$

$$\bar{\beta}(t) = \frac{1}{F} \int_V \phi(\mathbf{r}, t_0) \beta \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t_0) d^3r, \quad (3.35)$$

e

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \frac{1}{F} \int_V \phi(\vec{r}, t_0) \{ [\delta \nu \Sigma_f(\vec{r}, t) - \delta \Sigma_a(\vec{r}, t)] \phi(\vec{r}, t_0) \\ &+ \nabla \cdot (\delta D(\vec{r}, t) \nabla \phi(\vec{r}, t_0)) \} d^3r, \end{aligned} \quad (3.36)$$

com

$$F \equiv \int_V \phi(\mathbf{r}, t_0) \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, t_0) \phi(\mathbf{r}, t_0) d^3r. \quad (3.37)$$

Se o sistema for homogêneo, isto é, onde os parâmetros nucleares não variam com posição, tem-se que

$$F = \nu \Sigma_f(t_0) \int_V \phi(\mathbf{r}, t_0) \phi(\mathbf{r}, t_0) d^3r. \quad (3.38)$$

e, conseqüentemente,

$$A = \frac{1}{v \nu \Sigma_f(t_0)}, \quad (3.39)$$

$$\bar{\beta} = \frac{\beta}{\nu \Sigma_f(t_0)} \nu \Sigma_f(t) \quad (3.40)$$

e

$$\rho(t) = \frac{[\delta \nu \Sigma_f(t) - \delta \Sigma_a(t) - B^2 \delta D(t)]}{\nu \Sigma_f(t_0)}, \quad (3.41)$$

com

$$\nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t_0) = -B^2 \phi(\mathbf{r}, t_0) \quad (3.42)$$

e

$$B^2 \equiv \frac{(\nu \Sigma_f(t_0) - \Sigma_a(t_0))}{D(t_0)}. \quad (3.43)$$

3.2 Modelo

O modelo de cinética pontual estendido contém além das equações acopladas da densidade de nêutrons e da concentração de precursores de nêutrons atrasados, as equações apresentadas anteriormente que representam os efeitos dos venenos de nêutrons na população de nêutrons. Uma vez que venenos são gerados através de produtos de fissões de nêutrons com o combustível (considerando Urânio-235), tem-se que a primeira equação que descreve a variação da densidade nêutrons é alterada, pois como venenos são absorvedores, temos uma perda de nêutrons devido a seção de choque de captura de Xenônio e de Samário. Portanto, tem-se

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}n(t) &= \frac{\rho_c(t) - \bar{\beta}}{\Lambda}n(t) + \lambda C(t) - \sigma_{Xe}\bar{v}n(t)C_{Xe}(t) \\
&\quad - \sigma_{Sm}\bar{v}n(t)C_{Sm}(t) \\
\frac{d}{dt}C(t) &= \frac{\bar{\beta}}{\Lambda}n(t) - \lambda C(t) \\
\frac{d}{dt}C_I(t) &= \gamma_I\Sigma_f\bar{v}n(t) - \lambda_I C_I(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Xe}(t) &= \gamma_{Xe}\Sigma_f\bar{v}n(t) + \lambda_I C_I(t) - \lambda_{Xe}C_{Xe}(t) \\
&\quad - \sigma_{Xe}C_{Xe}(t)\bar{v}n(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Pm}(t) &= \gamma_{Pm}\Sigma_f\bar{v}n(t) - \lambda_{Pm}C_{Pm}(t) \\
\frac{d}{dt}C_{Sm}(t) &= \lambda_{Pm}C_{Pm}(t) - \sigma_{Sm}C_{Sm}(t)\bar{v}n(t)
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Analisa-se o comportamento dos venenos Xenônio e Samário e a alteração do número de nêutrons e seus precursores a medida que o tempo aumenta no reator. Observa-se que os termos que contém os produtos $C_{Xe}\bar{v}n(t)$ e $C_{Sm}\bar{v}n(t)$ dos nuclídeos Xenônio e Samário vem de $\rho(t)$, através do termo Σ_a da Equação (3.26). Trabalha-se com escala de tempo de longa duração, afim de analisar períodos como meses, dias ou até anos, uma vez que o decaimento dos venenos Xenônio e Samário possuem uma escala de maior duração.

3.3 Metodologia Aplicada

Considere o modelo de cinética pontual estendido (3.44). Tal sistema pode ser escrito na forma matricial onde, por conveniência, separa-se a parte linear das contribuições

não-lineares

$$\frac{d}{dt}\mathbf{Y} = \mathbf{A}\mathbf{Y} + \mathbf{N}\mathbf{Y}, \quad (3.45)$$

onde

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} n(t) \\ C(t) \\ C_I(t) \\ C_{Xe}(t) \\ C_{Pm}(t) \\ C_{Sm}(t) \end{bmatrix}, \quad (3.46)$$

\mathbf{A} é a matriz dos coeficientes constantes relacionados aos termos lineares do sistema e \mathbf{N} é a matriz que depende da densidade de nêutrons, dados respectivamente por

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{(\rho_c - \bar{\beta})}{\Lambda} & \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\bar{\beta}}{\Lambda} & -\lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_I \Sigma_f \bar{v} & 0 & -\lambda_I & 0 & 0 & 0 \\ \gamma_{Xe} \Sigma_f \bar{v} & 0 & \lambda_I & -\lambda_{Xe} & 0 & 0 \\ \gamma_{Pm} \Sigma_f \bar{v} & 0 & 0 & 0 & -\lambda_{Pm} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_{Pm} & 0 \end{bmatrix}, \quad (3.47)$$

e

$$\mathbf{N} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -\sigma_{Xe} \bar{v} n(t) & 0 & -\sigma_{Sm} \bar{v} n(t) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sigma_{Xe} \bar{v} n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\sigma_{Sm} \bar{v} n(t) \end{bmatrix}. \quad (3.48)$$

Logo, \mathbf{NY} também pode ser escrito como

$$\mathbf{NY} = \begin{bmatrix} -\sigma_{Xe}\bar{v}n(t)C_{Xe}(t) - \sigma_{Sm}\bar{v}n(t)C_{Sm}(t) \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma_{Xe}\bar{v}n(t)C_{Xe}(t) \\ 0 \\ -\sigma_{Sm}\bar{v}n(t)C_{Sm}(t) \end{bmatrix}. \quad (3.49)$$

Como a matriz \mathbf{N} depende apenas da densidade de nêutrons, veremos mais tarde que a não linearidade é controlada pela densidade de nêutrons, ou seja, quando a densidade de nêutrons for pequena pode-se perceber em uma boa aproximação que o sistema relevante para tempos maiores terá o comportamento do sistema linear. Isto é, como $n(t)$ cai várias ordens de grandeza para tempos longos, a não linearidade para a solução final praticamente não alterará o comportamento do sistema.

Para resolver o sistema (3.45), primeiramente, expande-se a solução em uma série infinita $\mathbf{Y} = \sum_{j=0}^{\infty} \mathbf{Y}_j$. A metodologia utilizada consiste em duas partes: a primeira é resolver o sistema linear com condições iniciais não homogêneas, enquanto a segunda parte encontra-se aproximações para a solução do sistema com termo fonte utilizando condições iniciais homogêneas, tratando o termo fonte como uma não linearidade obtida através do método da decomposição de Adomian. Estes novos graus de liberdade permitem converter o problema original em um esquema recursivo, onde a inicialização da recursão é definida pela parte linear do sistema de equações com uma solução conhecida que obedece às condições iniciais do problema original.

Na primeira parte, resolvemos o seguinte sistema

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\mathbf{Y}_0 &= \mathbf{AY}_0 \\ \mathbf{Y}_0(0) &= \mathbf{Y}_I \end{cases}, \quad (3.50)$$

onde \mathbf{Y}_I é o vetor das condições iniciais não homogêneas. Este sistema tem solução dada

por

$$\mathbf{Y}_0(\mathbf{t}) = \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{Y}_I. \quad (3.51)$$

A segunda parte é resolvida pelo meio de aproximações do sistema com fonte. A primeira aproximação é dada como

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\mathbf{Y}_1 &= \mathbf{A}\mathbf{Y}_1 + \mathbf{F}_1(\mathbf{Y}_0) \\ \mathbf{Y}_1(0) &= \mathbf{0} \end{cases}, \quad (3.52)$$

onde $\mathbf{A}\mathbf{Y}_1$ é o termo linear e $\mathbf{F}(\mathbf{Y}_0)$ é o termo fonte, onde \mathbf{F}_1 é obtido pelo método da decomposição de Adomian que depende apenas de \mathbf{Y}_0 . A solução para esse sistema é dada analiticamente por [Boyce e DiPrima, 2001]

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}_1(\mathbf{t}) &= \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{Y}_I + \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t-\tau))\mathbf{F}_1(\tau)d\tau \\ &= \exp(\mathbf{A}t)\mathbf{0} + \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t-\tau))\mathbf{F}_1(\tau)d\tau \\ &= \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t-\tau))\mathbf{F}_1(\mathbf{Y}_0)(\tau)d\tau. \end{aligned} \quad (3.53)$$

A segunda aproximação é dada por

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\mathbf{Y}_2 &= \mathbf{A}\mathbf{Y}_2 + \mathbf{F}_2(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1) \\ \mathbf{Y}_2(0) &= \mathbf{0} \end{cases}, \quad (3.54)$$

onde $\mathbf{A}\mathbf{Y}_2$ é o termo linear e $\mathbf{F}_2(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1)$ é obtido pelo método da decomposição de Adomian e depende de \mathbf{Y}_0 e \mathbf{Y}_1 . A solução para esse sistema é dada por

$$\mathbf{Y}_2(\mathbf{t}) = \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t-\tau))\mathbf{F}_2(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1)(\tau)d\tau. \quad (3.55)$$

Portanto, analogamente, todas os passos de recursões subsequentes são configurados por um sistema de equações lineares, onde a não-linearidade é representada por um termo fonte, o qual é composto somente de soluções dos passos de recursão anteriores. A solução

para a j -ésima recursão do sistema com fonte utilizando polinômios de Adomian será

$$\mathbf{Y}_j(\mathbf{t}) = \int_0^t \exp(\mathbf{A}(t - \tau)) \mathbf{F}_j(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_{j-1})(\tau) d\tau, \quad (3.56)$$

onde $\mathbf{F}_j(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_{j-1})$ é obtido pelo método da decomposição de Adomian. Uma vez que a série por \mathbf{Y}_j é convergente [Rudin, 1976], pode-se truncar a expansão em um j finito tal que a solução esteja contida dentro de uma precisão prescrita. A fim de minimizar o número de integrais a serem resolvidas, utiliza-se a diagonalização para calcular a exponencial da matriz da Equação (3.51) e da Equação (3.56).

3.3.1 Cálculo dos polinômios de Adomian

Para o cálculo dos polinômios de Adomian é utilizada a Equação (A.7), disponível no Apêndice A. Cabe ressaltar que a decomposição apresentada aqui não é única, para outras formas, ver [Silva, 2011]. O modelo de cinética pontual (3.44) possui não linearidades da forma $C_{Xe}(t)n(t)$ e $C_{Sm}(t)n(t)$, que representam o desaparecimento do nuclídeos (Xenônio ou Samário) através da captura de nêutrons. Uma vez que a construção dos polinômios para tais termos são similares, mostra-se a construção dos polinômios de Adomian para o caso geral dos termos não lineares do sistema, que podem ser expressos como

$$N(C_i, n) = C_i n, \quad (3.57)$$

sendo C_i a concentração isotópica do nuclídeo i , onde i é ou Xe ou Sm, e n sendo a densidade de nêutrons. Portanto, utilizando (A.7), temos os polinômios de Adomian para não linearidades do tipo $C_i n$

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

Analogamente, utilizando (A.7) tem-se

$$\begin{aligned}
A_4^i &= C_i^4 n_0 + C_i^3 n_1 + C_i^2 n_2 + C_i^1 n_3 + C_i^0 n_4, \\
A_5^i &= C_i^5 n_0 + C_i^4 n_1 + C_i^3 n_2 + C_i^2 n_3 + C_i^1 n_4 + C_i^0 n_5, \\
A_6^i &= C_i^6 n_0 + C_i^5 n_1 + C_i^4 n_2 + C_i^3 n_3 + C_i^2 n_4 + C_i^1 n_5 + C_i^0 n_6, \\
A_7^i &= C_i^7 n_0 + C_i^6 n_1 + C_i^5 n_2 + C_i^4 n_3 + C_i^3 n_4 + C_i^2 n_5 + C_i^1 n_6 + C_i^0 n_7, \\
A_8^i &= C_i^8 n_0 + C_i^7 n_1 + C_i^6 n_2 + C_i^5 n_3 + C_i^4 n_4 + C_i^3 n_5 + C_i^2 n_6 + C_i^1 n_7 \\
&\quad + C_i^0 n_8, \\
A_9^i &= C_i^9 n_0 + C_i^8 n_1 + C_i^7 n_2 + C_i^6 n_3 + C_i^5 n_4 + C_i^4 n_5 + C_i^3 n_6 + C_i^2 n_7 + \\
&\quad + C_i^1 n_8 + C_i^0 n_9.
\end{aligned} \tag{3.58}$$

Desse modo, o polinômio A_j^i é dado por

$$A_j^i = \sum_{k=0}^j C_i^{j-k} n_k. \tag{3.59}$$

Pode-se ainda escrever matricialmente o termo $\mathbf{F}_1(\mathbf{Y}_0)$ como

$$\mathbf{F}_1(\mathbf{Y}_0) = \begin{bmatrix} -\sigma_{Xe} \bar{v} C_{Xe}^0(t) n_0(t) - \sigma_{Sm} \bar{v} n_0(t) C_{Sm}^0(t) \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma_{Xe} \bar{v} n_0(t) C_{Xe}^0(t) \\ 0 \\ -\sigma_{Sm} \bar{v} n_0(t) C_{Sm}^0(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sigma_{Xe} \bar{v} A_0^{Xe} - \sigma_{Sm} \bar{v} A_0^{Sm} \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma_{Xe} \bar{v} A_0^{Xe} \\ 0 \\ -\sigma_{Sm} \bar{v} A_0^{Sm} \end{bmatrix} \tag{3.60}$$

onde C_{Xe}^0 , C_{Sm}^0 e n_0 representam a solução do passo zero encontrada ao resolver o sistema linear. Para iterações sucessivas são utilizados termos obtidos através da resolução do sistema com fonte. Assim, $\mathbf{F}_j(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_{j-1})$ pode ser escrito como

$$\mathbf{F}_j(\mathbf{Y}_0, \mathbf{Y}_1, \dots, \mathbf{Y}_{j-1}) = \begin{bmatrix} -\sigma_{Xe}\bar{v}A_{j-1}^{Xe} - \sigma_{Sm}\bar{v}A_{j-1}^{Sm} \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma_{Xe}\bar{v}A_{j-1}^{Xe} \\ 0 \\ -\sigma_{Sm}\bar{v}A_{j-1}^{Sm} \end{bmatrix}. \quad (3.61)$$

4 RESULTADOS NUMÉRICOS: CINÉTICA PONTUAL

Nesse capítulo apresentam-se resultados para o modelo proposto utilizando o método da decomposição de Adomian e técnicas numéricas previamente apresentadas a fim de resolver as equações de cinética para escalas de tempo de longa duração acopladas aos venenos produtos de fissão para diversos tipos de reatividade. Assumem-se dois casos: o caso A onde trata-se a reatividade constante e o caso B, onde a reatividade é variável com o tempo. Considera-se um grupo de precursores que representam a fração de nêutrons atrasados.

No Apêndice B encontram-se resultados do comportamento da densidade de nêutrons, da concentração dos precursores e da concentração dos venenos para diferentes tipos de reatividades. Utilizam-se condições iniciais que ocorrem em um reator novo, onde se tem somente elementos novos. Nessas condições, os venenos são nulos inicialmente. As condições iniciais utilizadas, em cm^{-3} , são

$$\begin{aligned} n(0) &= 2,5 \times 10^{10}, \\ C(0) &= 1 \times 10^{12}, \\ C_I(0) &= 0, \\ C_{Xe}(0) &= 0, \\ C_{Pm}(0) &= 0, \\ C_{Sm}(0) &= 0. \end{aligned}$$

As constantes físicas utilizadas para as simulações são [Nichols et al., 2008]

$$\begin{array}{llll} \bar{\beta} = 0,0065, & \gamma_I = 0,0629, & \lambda_{Xe} = 0,0762 & [h^{-1}], \\ \Sigma_f = 3,3303 \times 10^{-2} & [cm^{-1}], & \gamma_{Xe} = 0,0025761, & \sigma_{Sm} = 4,1 \times 10^{-20} & [cm^2], \\ \Lambda = 2,7778 \times 10^{-8} & [h], & \gamma_{Pm} = 0,010816, & \lambda_{Pm} = 0,013059 & [h^{-1}], \\ \lambda = 278,68 & [h^{-1}], & \sigma_a = 9,9 \times 10^{-25} & [cm^2], & \sigma_{Xe} = 2,6 \times 10^{-18} & [cm^2], \\ \lambda_I = 0,1055 & [h^{-1}], & \bar{v} = 1,1035 \times 10^7 & [cm/h], \end{array}$$

4.1 Caso A: Reatividade constante

Para o exemplo 1, considera-se a reatividade negativa com ordem de 10^{-4} , isto é, $\rho_c = -0,0001$. As Figuras 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 avaliam o comportamento da densidade de nêutrons $n(t)$, da concentração de precursores de nêutrons atrasados $C(t)$ e da concentração dos venenos $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ em função da escala de tempo de longa duração, dada em horas.

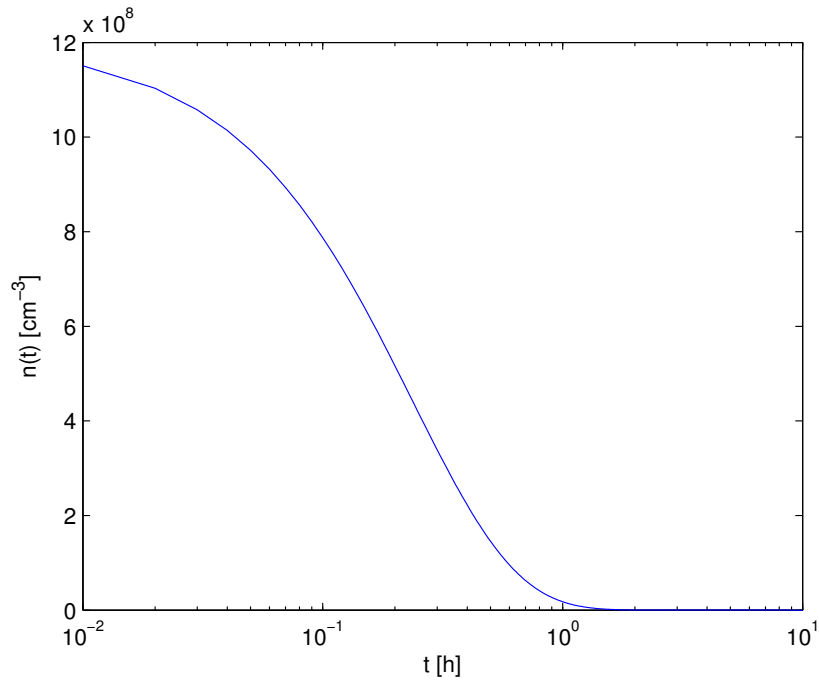


Figura 4.1: Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$.

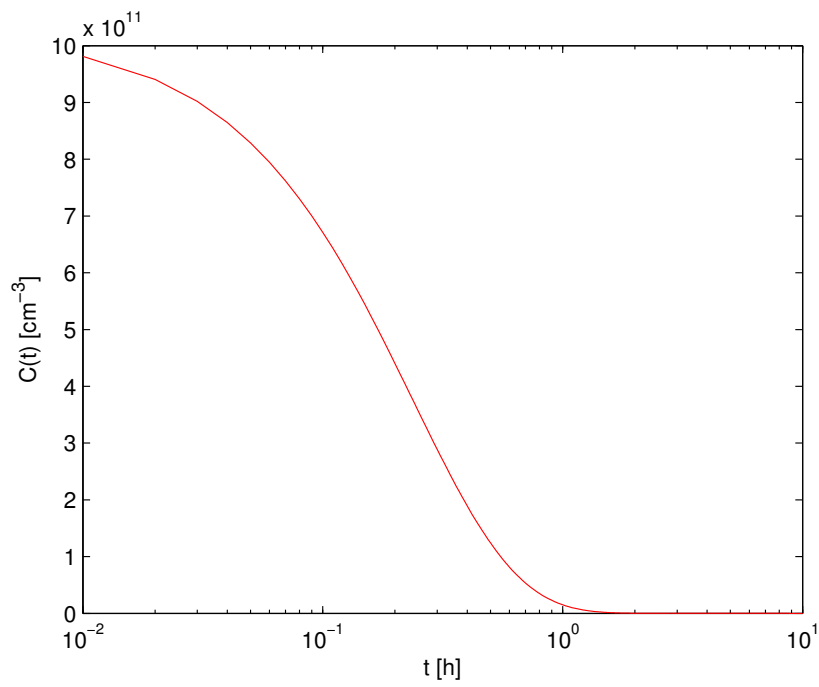


Figura 4.2: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$.

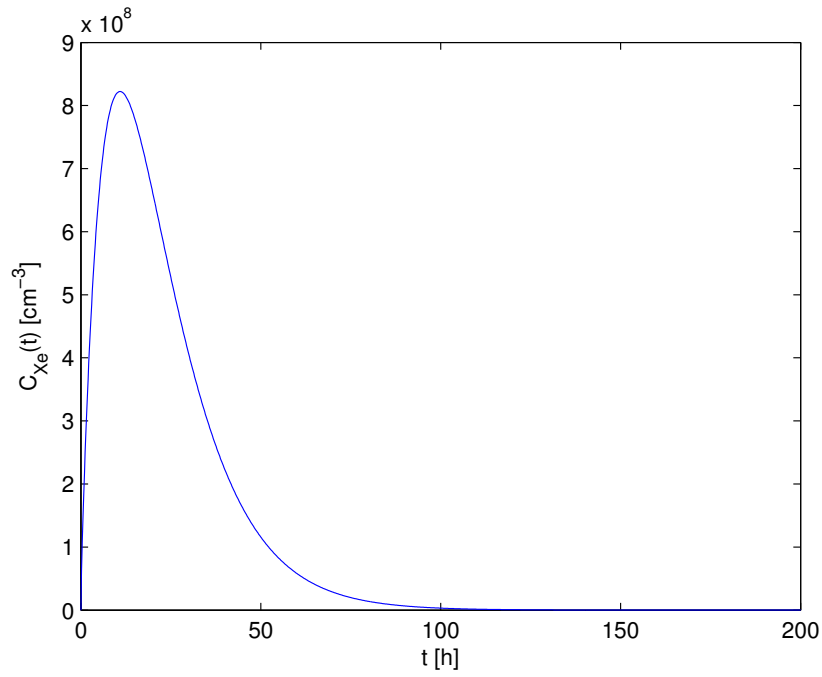


Figura 4.3: Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$.

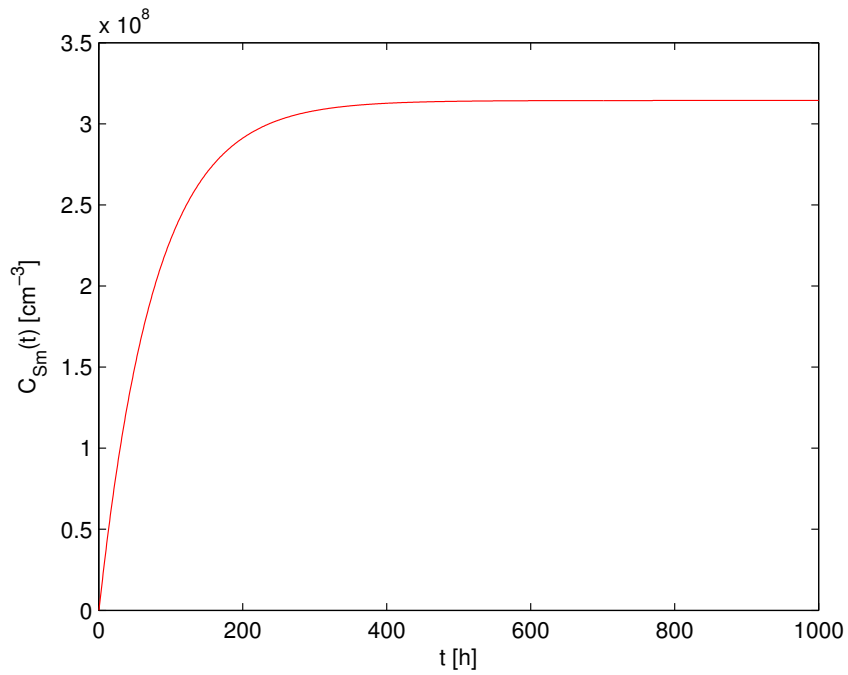


Figura 4.4: Concentração de Samário em função do tempo t em horas com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$.

Em todos os casos a solução funciona conforme o esperado, o que nos garante que o algoritmo é de fato robusto. Observa-se que para estado subcrítico, nas Figuras 4.1 e 4.2, a densidade de nêutrons decresce a medida que o tempo aumenta, assim como a concentração de precursores de nêutrons atrasados, seguindo o perfil físico do problema em consideração para $\rho_c < 0$. Cabe ressaltar que para $\rho_c < 0$ contabiliza-se somente resultados para $\rho_c < \beta$, pois quando $\rho_c > \beta$ o reator torna-se praticamente fora de controle, o que sugere que a contribuição dos atrasados é desprezível frente aos nêutrons prontos. Para $\rho_c < \beta$ o tempo de geração de nêutrons tem pouco influência no comportamento do reator [Petersen, 2011].

Na Figura 4.3 a concentração de Xenônio aumenta devido o decaimento do Iodo. Nota-se que Xenônio possui um pico máximo cerca de 10 horas após o "shutdown" e após, decresce devido o seu decaimento. Na Figura 4.4 o equilíbrio do Samário é alcançado aproximadamente em 20 dias (500 horas) e como Samário é estável, sua concentração permanece constante durante a operação do reator.

Nota-se que a concentração de Samário não possui um pico como Xenônio, porém, aumenta lentamente até atingir um valor máximo. A concentração de Samário é menor quando comparado a concentração de Xenônio. O equilíbrio da concentração de Samário independe do nível de potência.

Quando a reatividade é positiva, o reator torna-se praticamente fora de controle para tempos maiores, para $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$, conforme a Tabela 4.1. A precisão dos resultados aqui mostrados pode ser obtida limitando-se o método recursivo para o caso de cinética pontual após nove recursões.

Tabela 4.1: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c > 0$.

$\rho_c(t) = 0,0001$				
t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
0,2	1913528980,12239	1582093272220,70	52239673,8045568	103851,941637065
0,4	2956045524,75818	2444039235656,75	142857109,295835	487576,156935566
0,5	4566539116,23462	3775585099722,31	292625137,659194	1303359,54481490
1	7054451145,63891	5832575285562,88	533587387,745276	2786302,85293843
2	95877828052,4887	79271465339736,5	9638453927,97309	67838440,9768743
5	7419047869861,24	6,1358848007e+15	762727993441,585	5628757409,47788
10	566150508223527	4,7489860440e+17	36472042043501,4	432626779586,137

4.2 Caso B: Reatividade dependente do tempo

Analisa-se o comportamento da densidade de nêutrons, da concentração de precursores de nêutrons atrasados e da concentração dos venenos produtos de fissão Samário e Xenônio para a reatividade dependente do tempo. Utiliza-se o caso em que a reatividade varia com o tempo de forma linear, o caso em que a reatividade se comporta de forma oscilatória (periódica) e o caso que a reatividade é função definida por partes, isto é

$$\begin{aligned} \rho_c(t) &= \rho_1 t \\ \rho_c(t) &= \rho_1 \sin(at) \\ \rho_c(t) &= \begin{cases} \rho_1 > 0, & \text{mod}(t, 12) = 0, 1, 2, 3 \\ \rho_2 = 0, & \text{mod}(t, 12) = 4, 5, 6, 7 \\ \rho_3 < 0, & \text{mod}(t, 12) = 8, 9, 10, 11 \end{cases}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 e a são constantes. No caso em que a reatividade é definida por partes o objetivo é simular um reator tendo sua reatividade variando de forma abrupta, entre positiva, nula e negativa de quatro em quatro horas até chegar ao tempo do ciclo do combustível no reator. Utiliza-se a reatividade do tipo periódica com o objetivo de propor uma simulação onde se tem um comportamento que possua picos máximos e mínimos, e que isso se repita em períodos. Analisa-se a densidade de nêutrons, a concentração de nêutrons atrasados e as concentrações dos venenos em ciclos diurnos onde ocorrem máximos (ou mínimos) de 12 em 12 horas.

Nas Figuras 4.5, 4.6, 4.7, 4.8, 4.9, 4.10, 4.11 e 4.12 avalia-se a densidade de nêutrons, da concentração dos precursores e dos venenos Xenônio e Samário para reatividades do tipo linear positivas e negativas, a saber, $\rho_c = 0,0005t$ e $\rho_c = -0,0005t$, respectivamente.

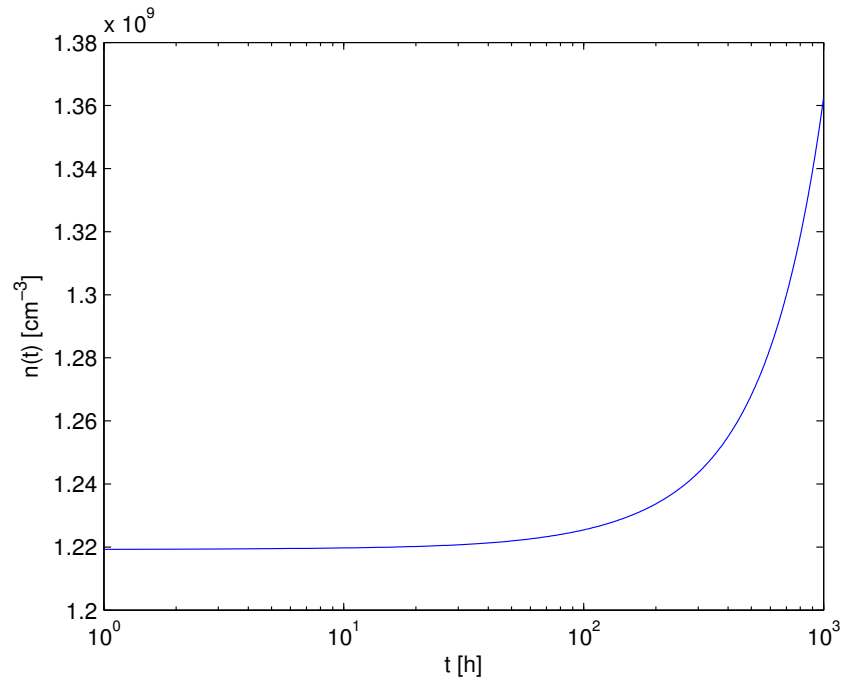


Figura 4.5: Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0005t$.

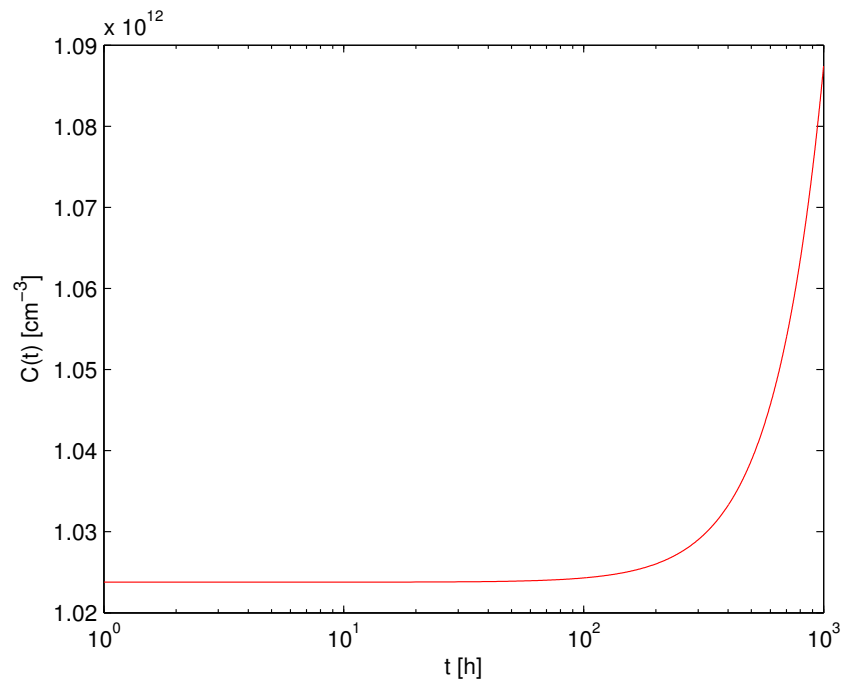


Figura 4.6: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0005t$.

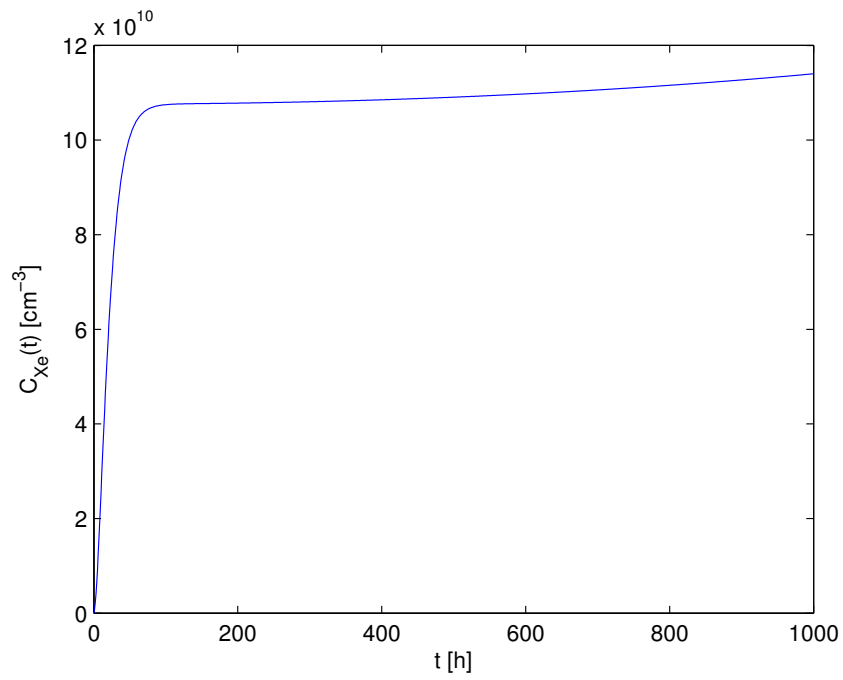


Figura 4.7: Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0005t$.

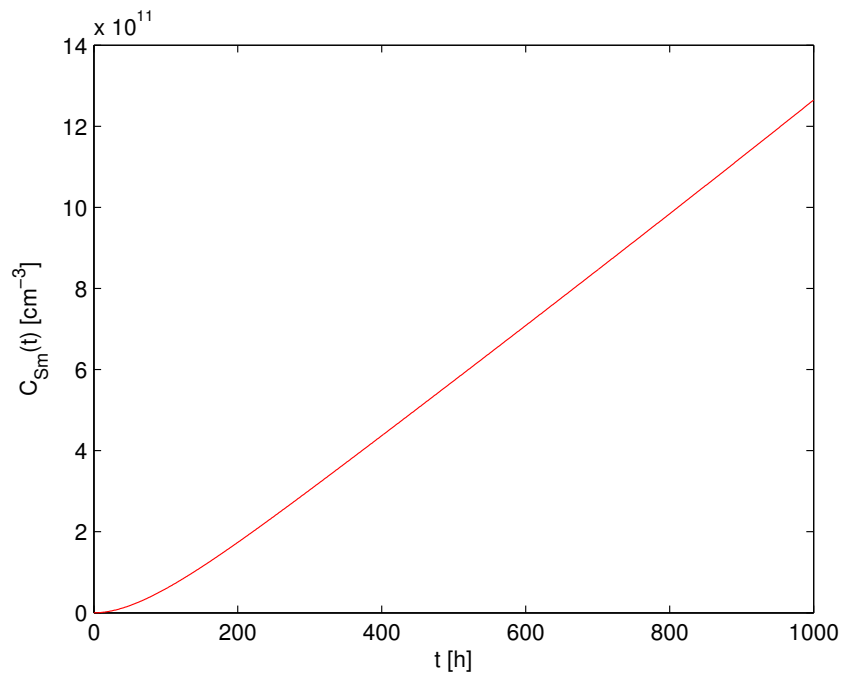


Figura 4.8: Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0005t$.

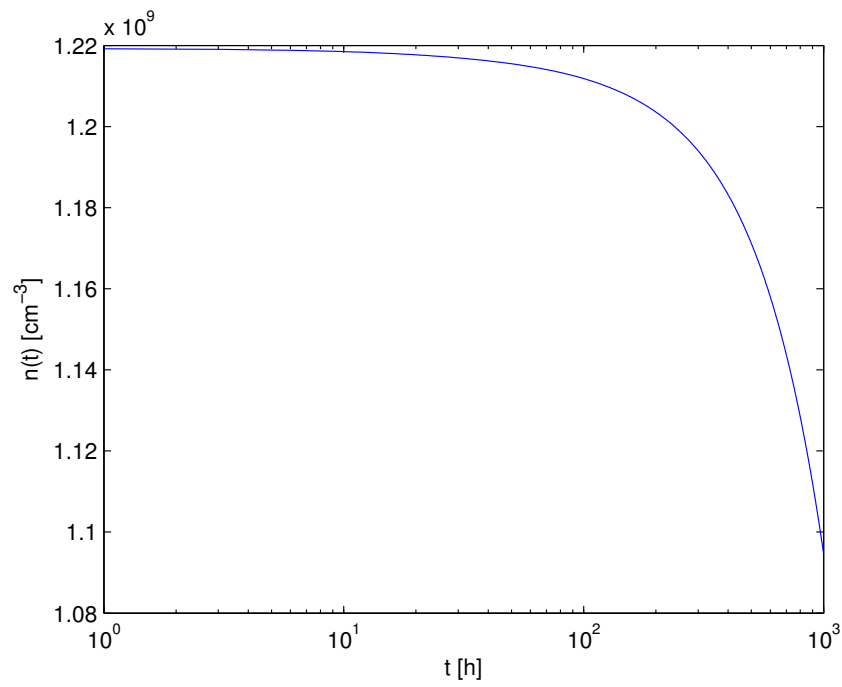


Figura 4.9: Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0005t$.

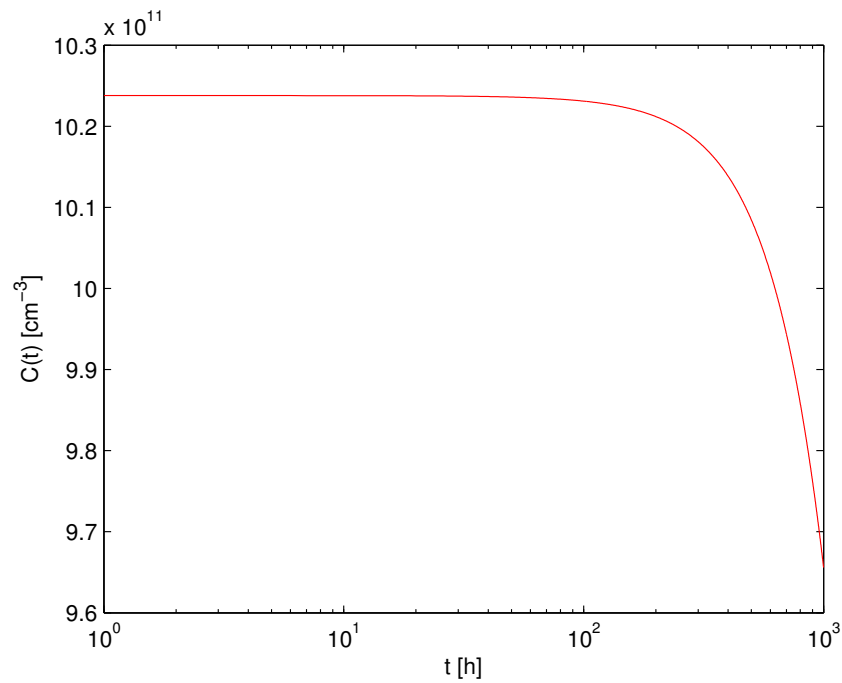


Figura 4.10: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0005t$.

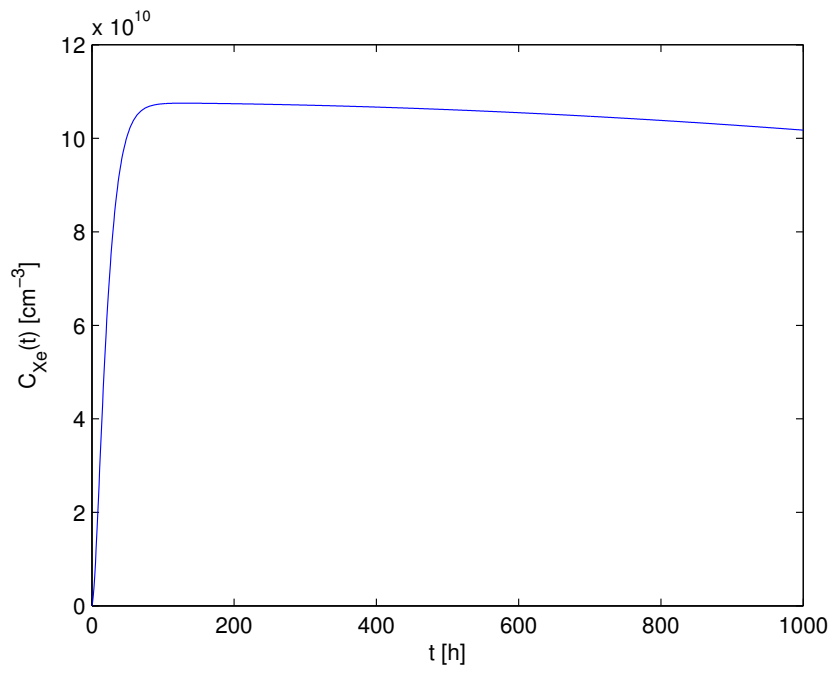


Figura 4.11: Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0005t$.

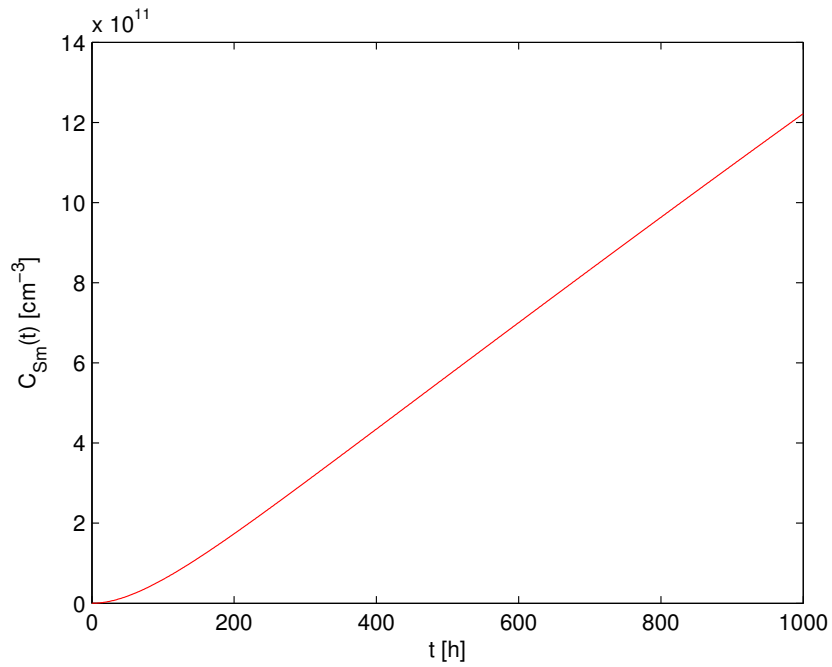


Figura 4.12: Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0005t$.

Nas Figuras 4.13, 4.14, 4.15 e 4.16 avalia-se o comportamento da densidade de nêutrons bem como de seus precursores e os venenos Xenônio e Samário para reatividade do tipo periódica. Utiliza-se $\rho_c(t) = \rho_1 \sin\left(\frac{2\pi}{12}t\right)$ afim de simular dois períodos por dia, de 12 horas cada. Nota-se que jamais entraremos em regime estacionário com essa escolha periódica de $\rho_c(t)$. Nas Figuras 4.13 e 4.14 tem-se o comportamento da densidade de nêutrons e da concentração de precursores de nêutrons atrasados numa escala de 100 horas (em torno de 4 dias). Resultados onde a reatividade varia na forma periódica positiva são apresentados no Apêndice.

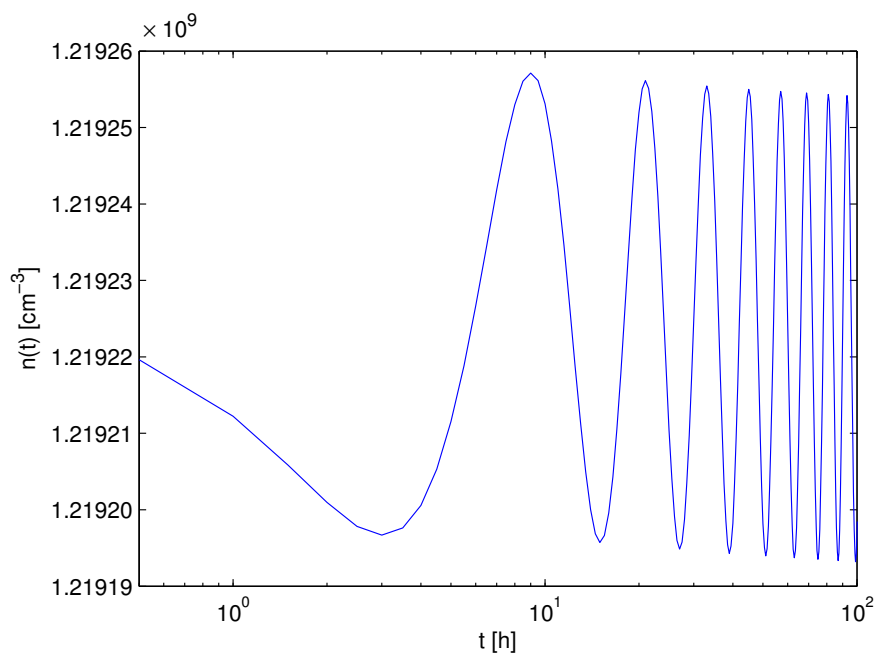


Figura 4.13: Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

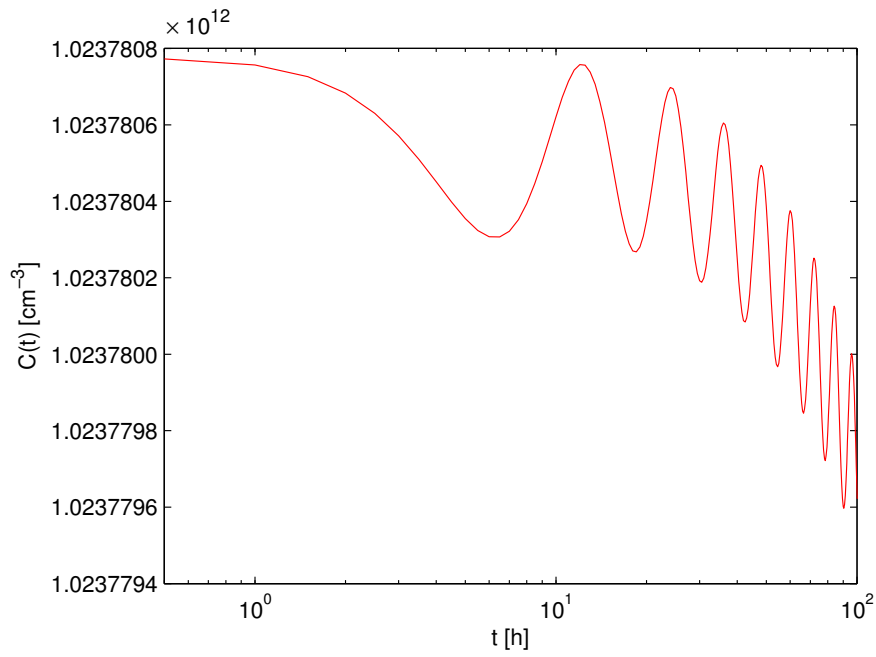


Figura 4.14: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

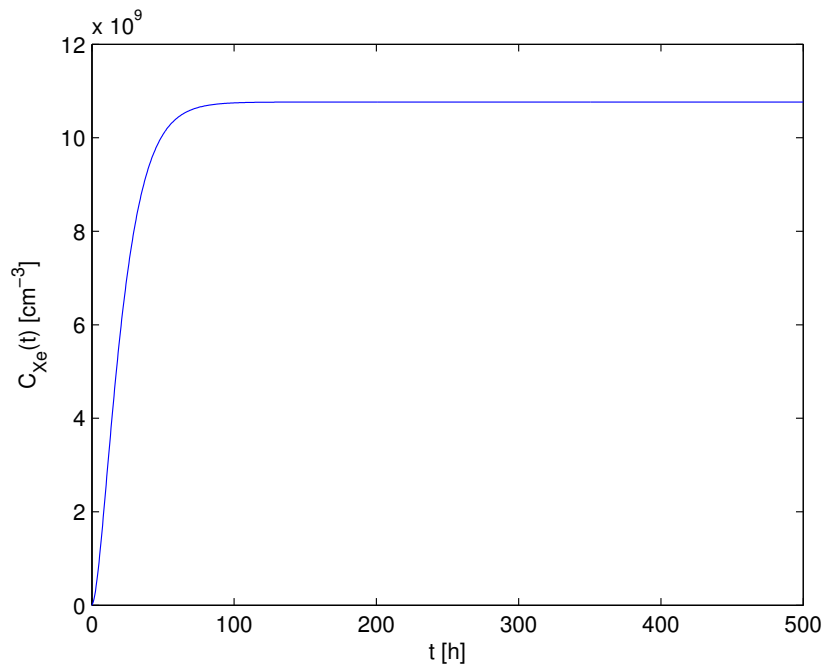


Figura 4.15: Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

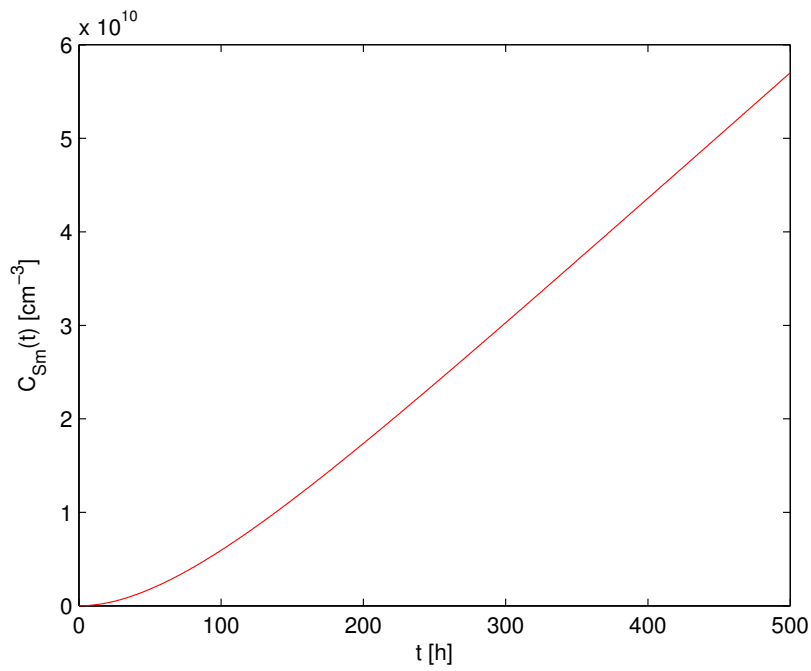


Figura 4.16: Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

Nas Figuras 4.17, 4.18, 4.19 e 4.20 avalia-se o comportamento de $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ onde a reatividade varia entre positiva, nula e negativa de quatro em quatro horas. Resultados onde a reatividade varia entre negativa, nula e positiva são apresentados no Apêndice C.

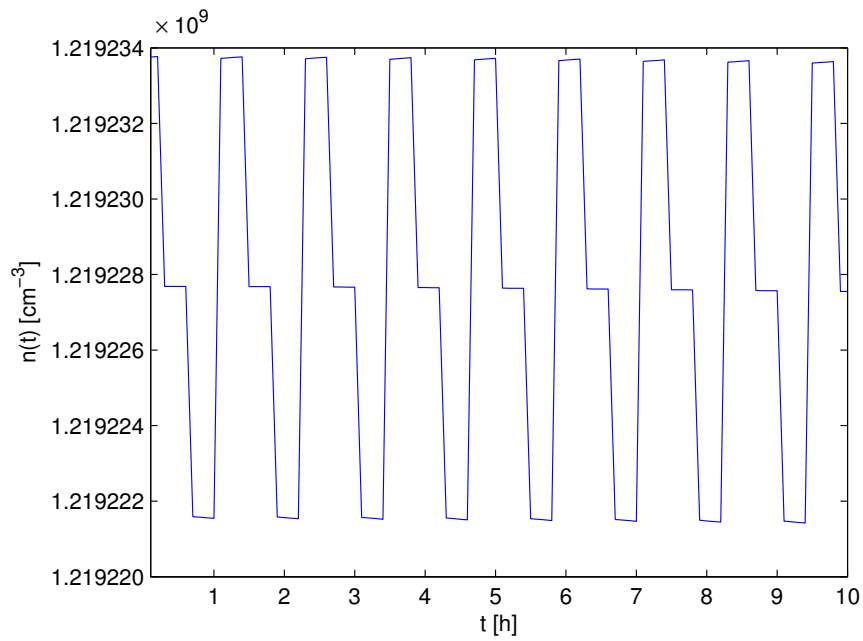


Figura 4.17: $n(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$.

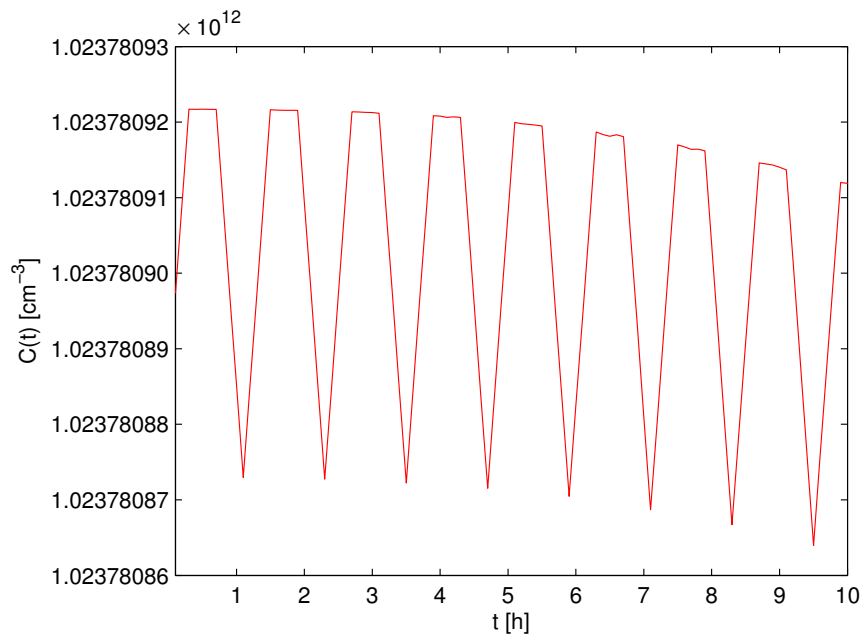


Figura 4.18: $C(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$.

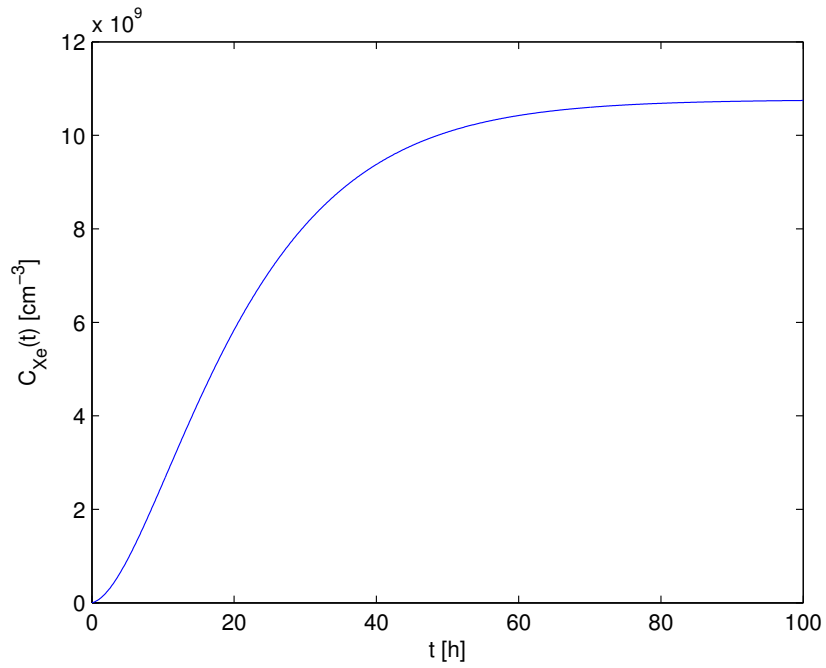


Figura 4.19: $C_{Xe}(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$.

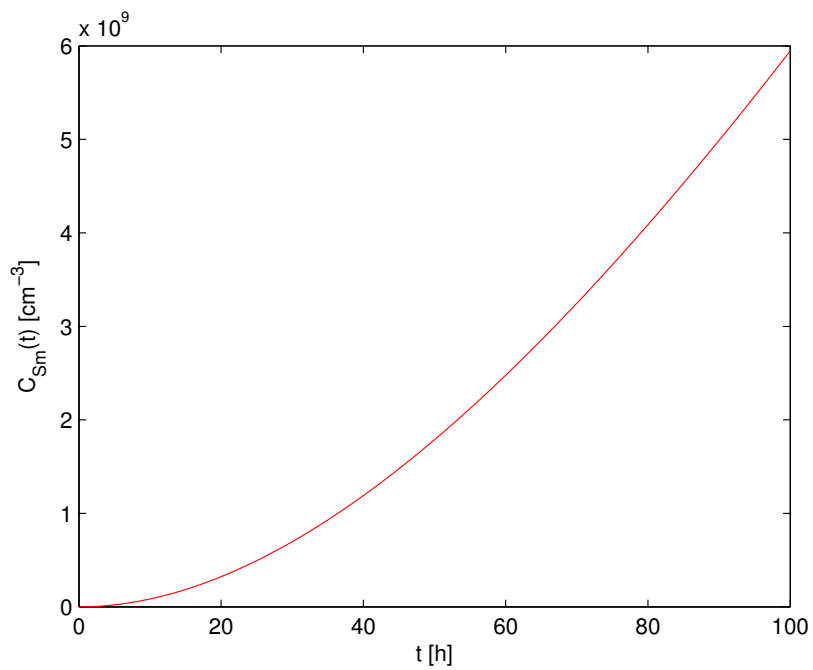


Figura 4.20: $C_{Sm}(t)$ em função do tempo t em horas com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$.

No caso em que a reatividade é do tipo linear a densidade de nêutrons segue o perfil esperado, para ambos os casos (positivo e negativo). Devido a um aumento da reatividade negativa, a densidade de nêutrons também decresce, como uma consequência da diminuição da taxa de fissão assim como para a concentração de precursores de nêutrons atrasados. De fato, a evolução no tempo da densidade de nêutrons e da concentração de precursores é semelhante. Por causa das escalas de tempo que caracterizam as cadeias de decaimento que levam a Xenônio-135 e Samário-149, a evolução no tempo de Xenônio-135 tem um aumento e, devido sua meia-vida ser $T_{1/2}^{(Xe)} = 9.2h$, após um máximo segue uma curva de decaimento. Diferentemente ocorre para Samário-149, que como é um isótopo estável, a curva de concentração aumenta até um limite assintótico. Devido o desaparecimento da densidade de nêutrons não existe nenhum mecanismo para reduzir C_{Sm} que não seja a absorção de nêutrons.

Quando a reatividade se comporta de forma oscilatória, se aumentarmos o valor absoluto de ρ_1 , temos que a densidade oscilará em uma amplitude maior. No exemplo em que $\rho_c(t)$ é negativo, tem-se um decrescimento inicial tanto para a concentração de precursores quanto para a densidade de nêutrons. Quando $\rho_c(t)$ é positivo (ver Apêndice C), tem-se um crescimento inicial para $n(t)$ e $C(t)$. Como a concentração de precursores é produzida em cadeias de decaimento de produtos de fissão, nota-se uma diferença de fase entre a densidade de nêutrons e a variação da concentração de precursores de nêutrons atrasados.

É observado um decrescimento suave tanto em $n(t)$ quanto em $C(t)$ para a reatividade oscilatória. Isso ocorre devido a remoção de nêutrons pela absorção dos venenos. Nota-se ainda um resultado inusitado para as concentrações de Xenônio e Samário, uma vez que $C_{Xe}(t) < C_{Sm}(t)$, contrariando as meias-vidas dos elementos. Portanto, pode-se observar que escalas curtas manifestam-se em escalas longas de tempo e vice-versa.

Quando a reatividade é definida por partes, nota-se uma oscilação decrescendo suavemente em $n(t)$ e em $C(t)$. Novamente é observado a influência de escalas compridas de tempo nas escalas curtas de tempo. As concentrações $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ seguem o mesmo perfil do caso oscilatório, onde a concentração de Samário aumenta durante todo o período de tempo e a concentração de Xenônio aumenta mais rapidamente nas primeiras 50 horas e após esse tempo sua concentração atinge um valor assintótico. Os resultados obtidos para os casos considerados são consistentes com a física do problema considerado.

4.3 Elementos de combustível reutilizados

Apresentam-se os resultados para o modelo proposto usando como condições iniciais elementos de combustível reutilizado. As condições iniciais utilizadas foram as quantidades finais de venenos em um reator que operou durante o tempo $t = 10^3$ horas. Para algumas reatividades simuladas existiam venenos no reator. Em todos os casos simulados, Samário estava presente, uma vez que é um elemento estável. Foram utilizados os mesmos valores (reator com elementos novos) para a densidade de nêutrons e a concentração de precursores de nêutrons atrasados.

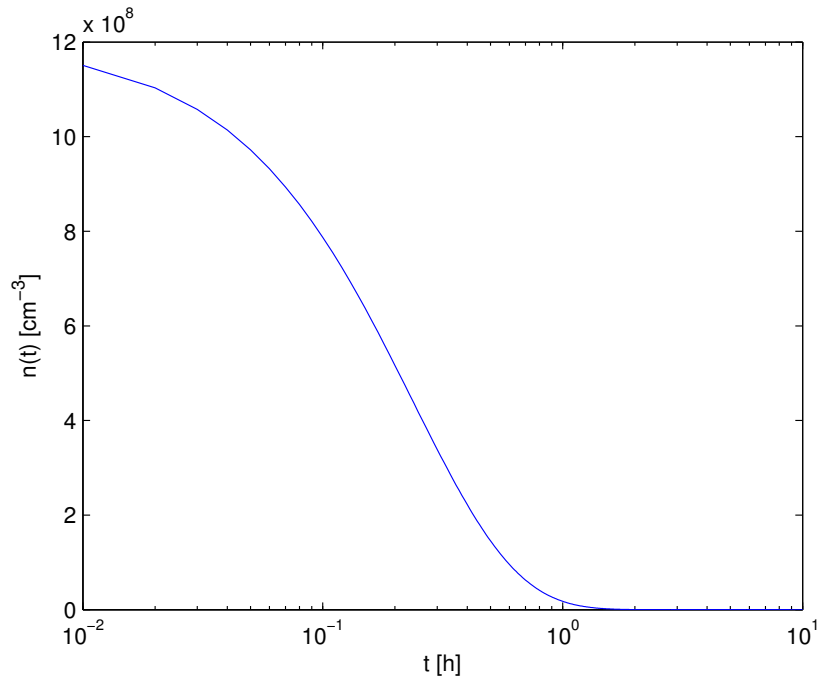


Figura 4.21: Densidade de nêutrons em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

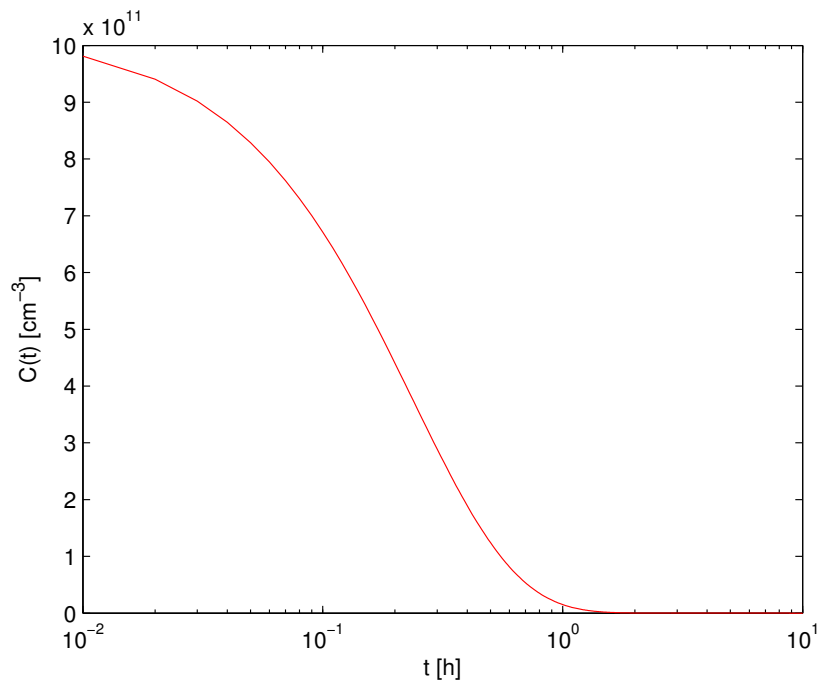


Figura 4.22: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

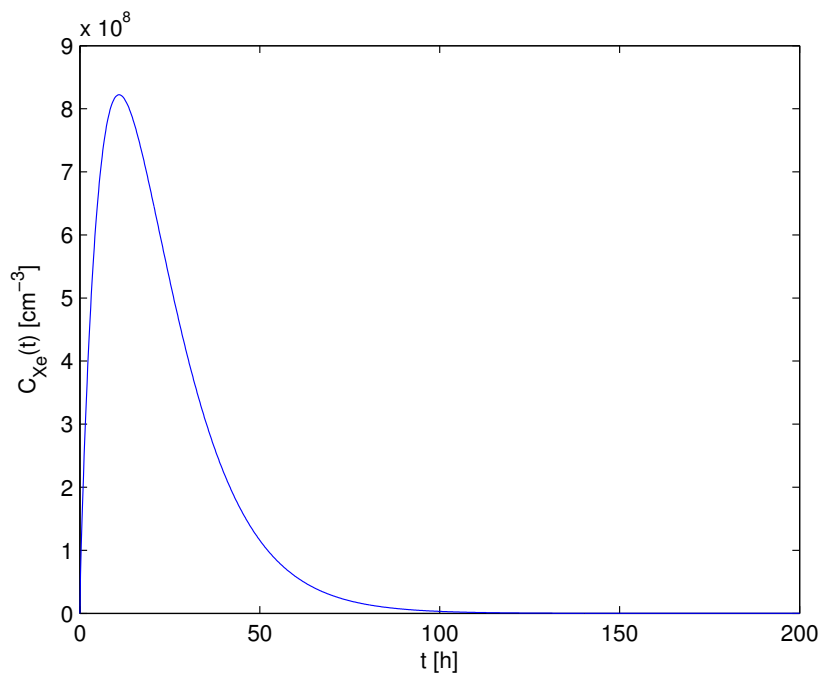


Figura 4.23: Concentração de Xenônio em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

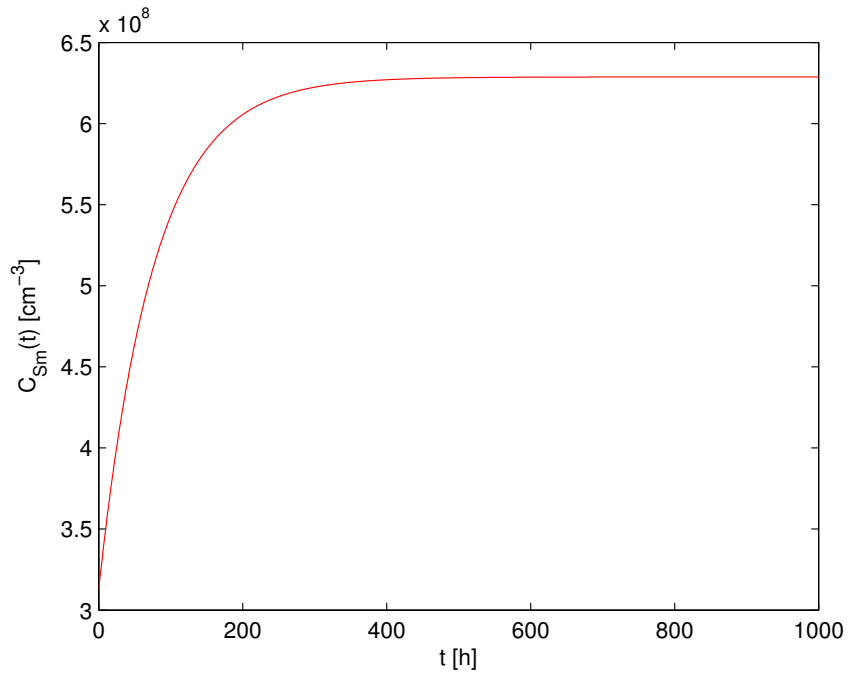


Figura 4.24: Concentração de Samário em função do tempo t com reatividade constante $\rho_c = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

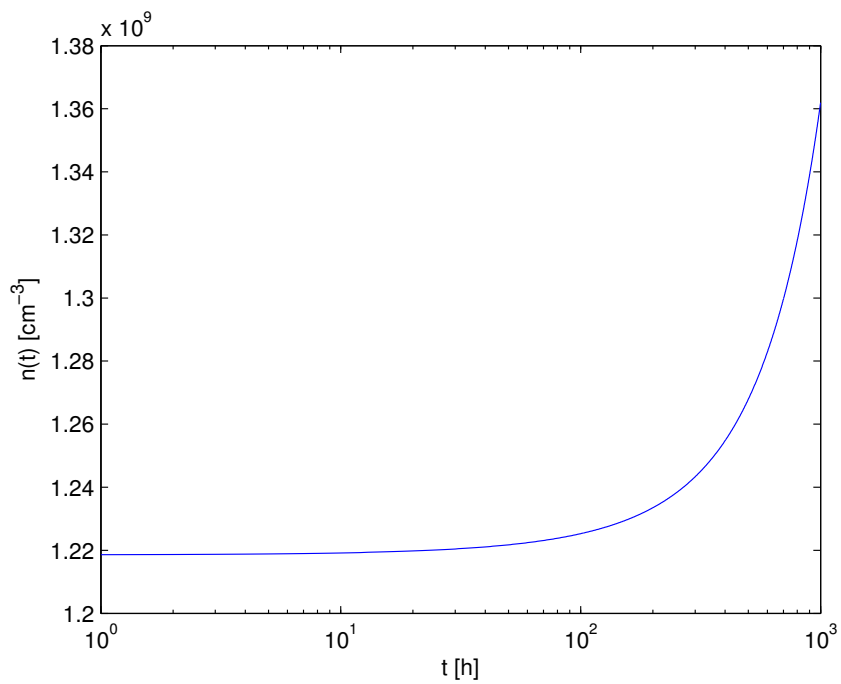


Figura 4.25: Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

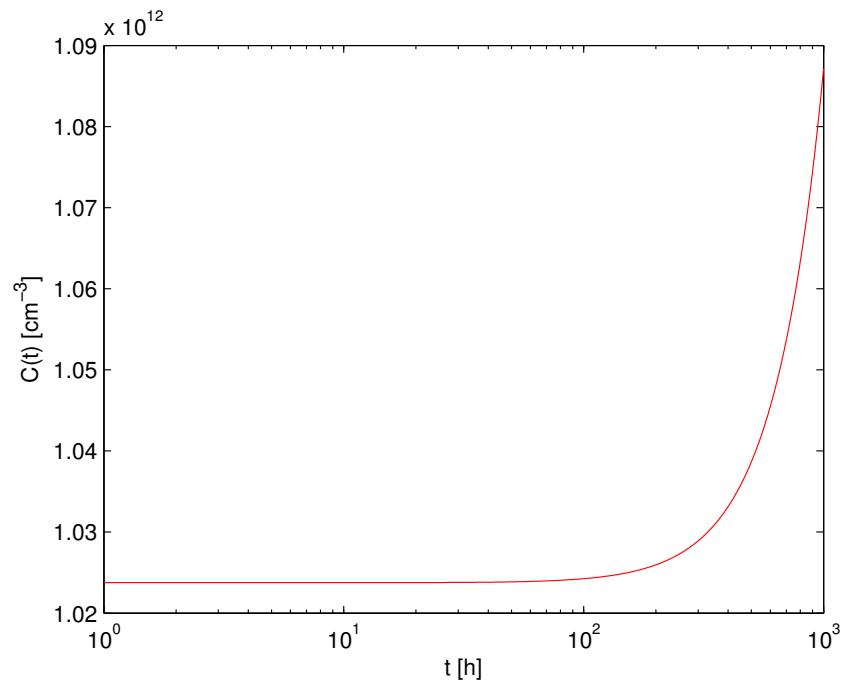


Figura 4.26: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

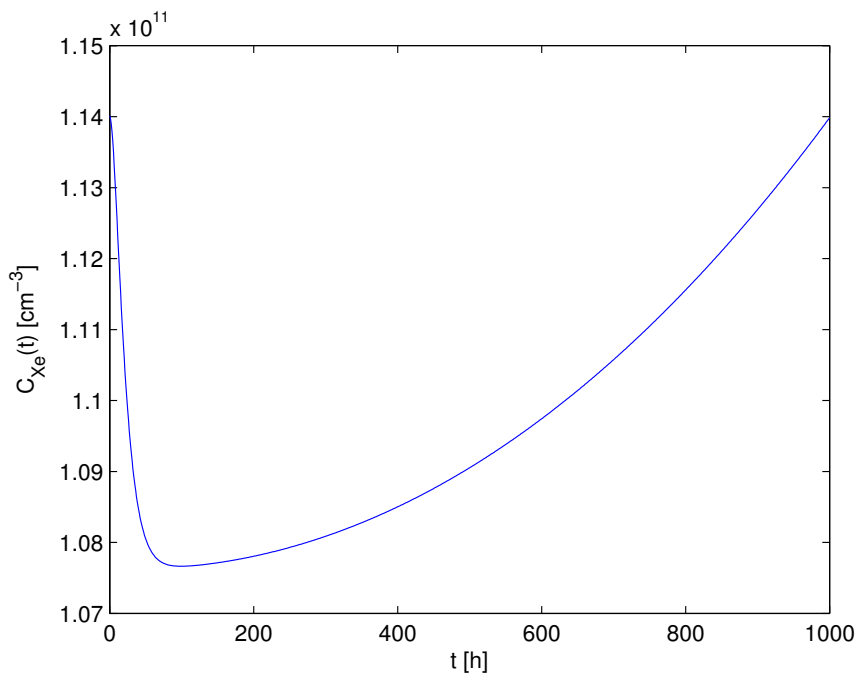


Figura 4.27: Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

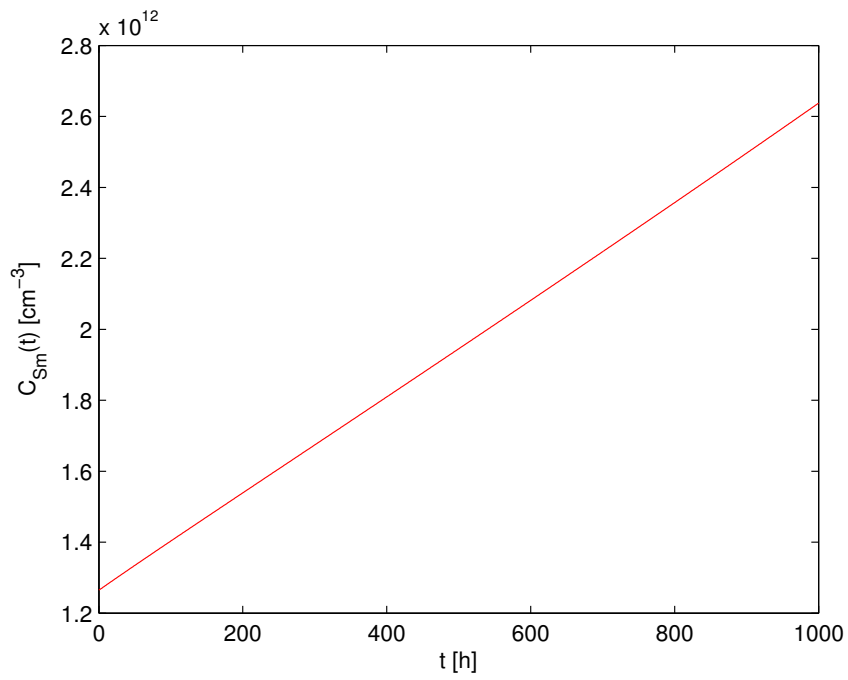


Figura 4.28: Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = 0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

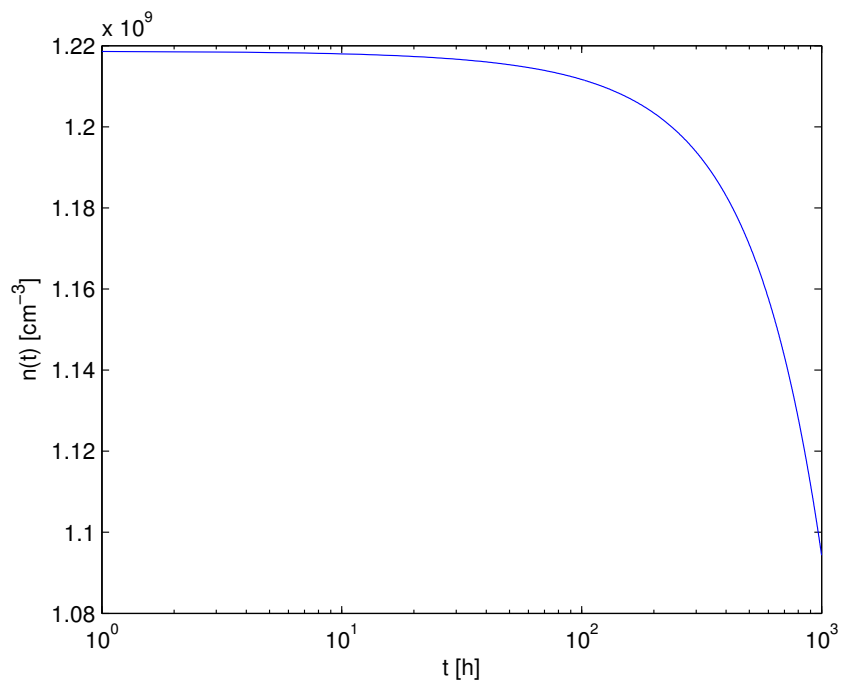


Figura 4.29: Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

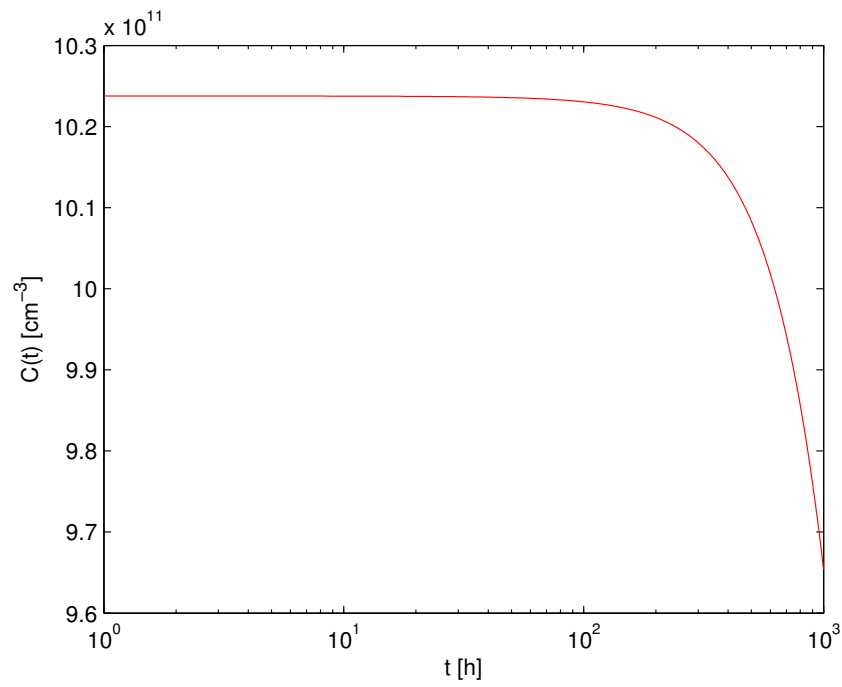


Figura 4.30: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

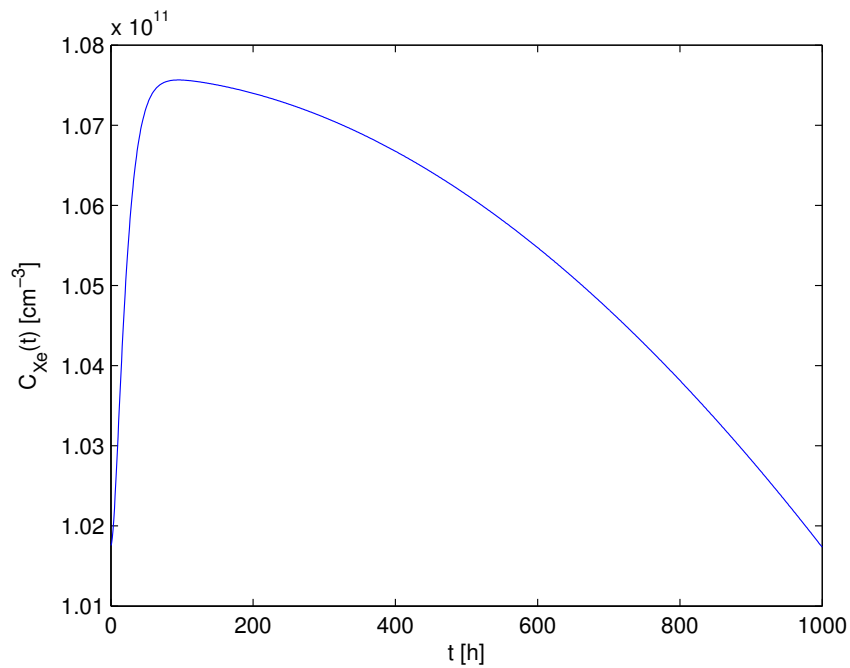


Figura 4.31: Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

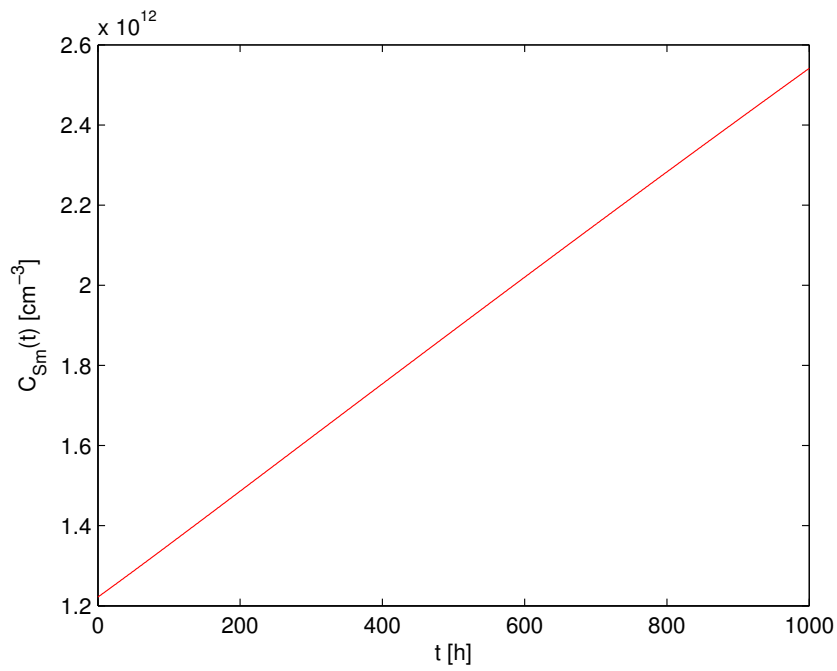


Figura 4.32: Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = -0,0005t$ em um reator com elementos reutilizados.

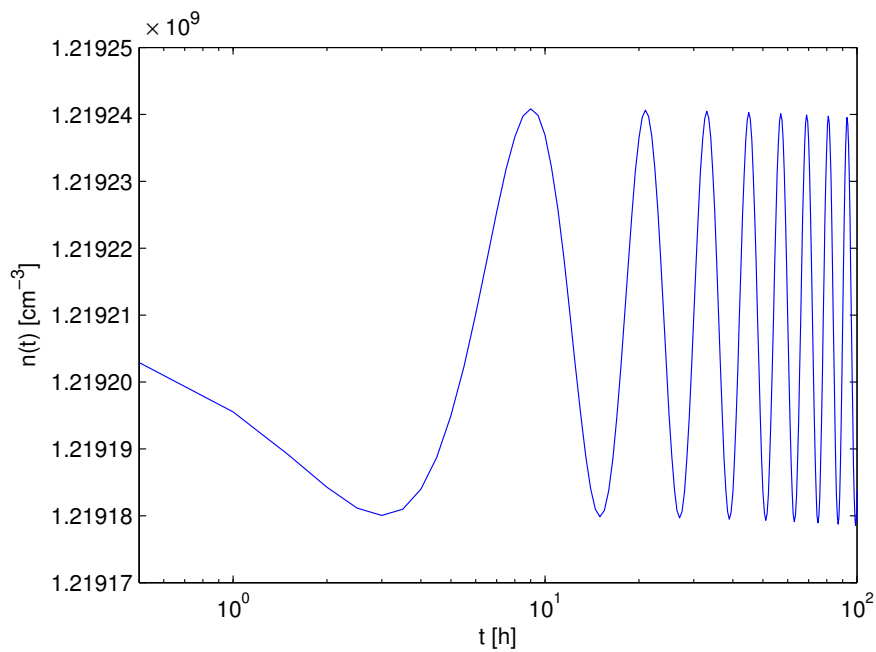


Figura 4.33: Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$ em um reator com elementos reutilizados.

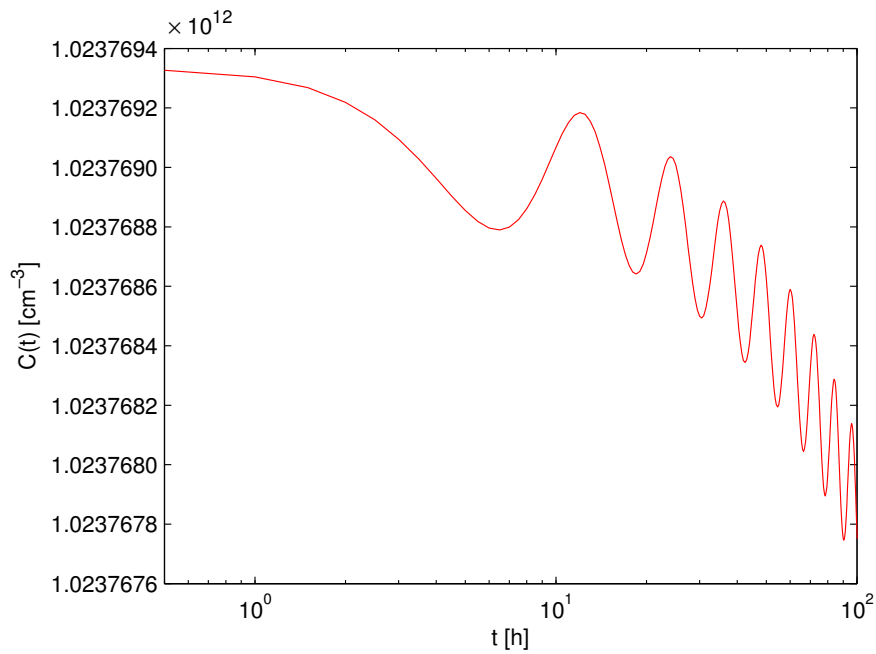


Figura 4.34: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$ em um reator com elementos reutilizados.

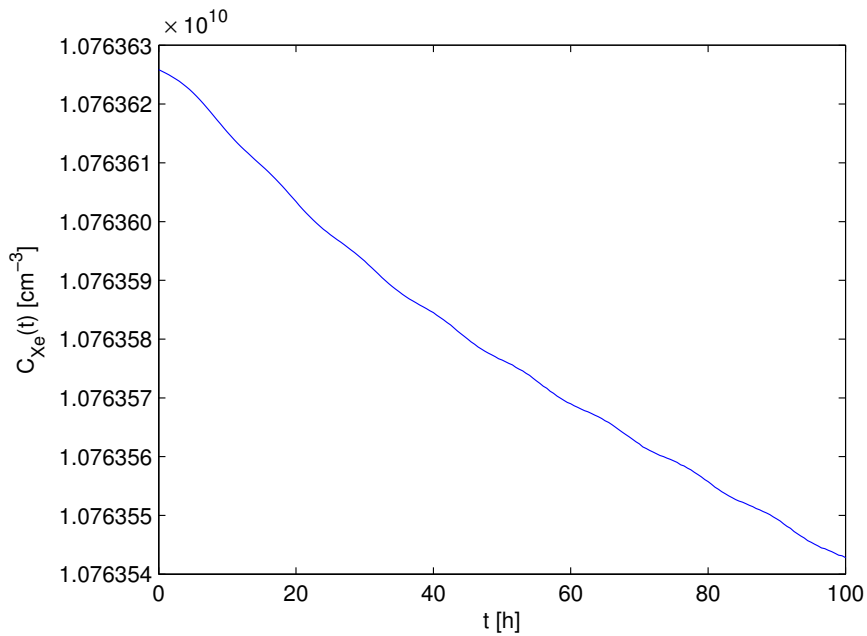


Figura 4.35: Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$ em um reator com elementos reutilizados.

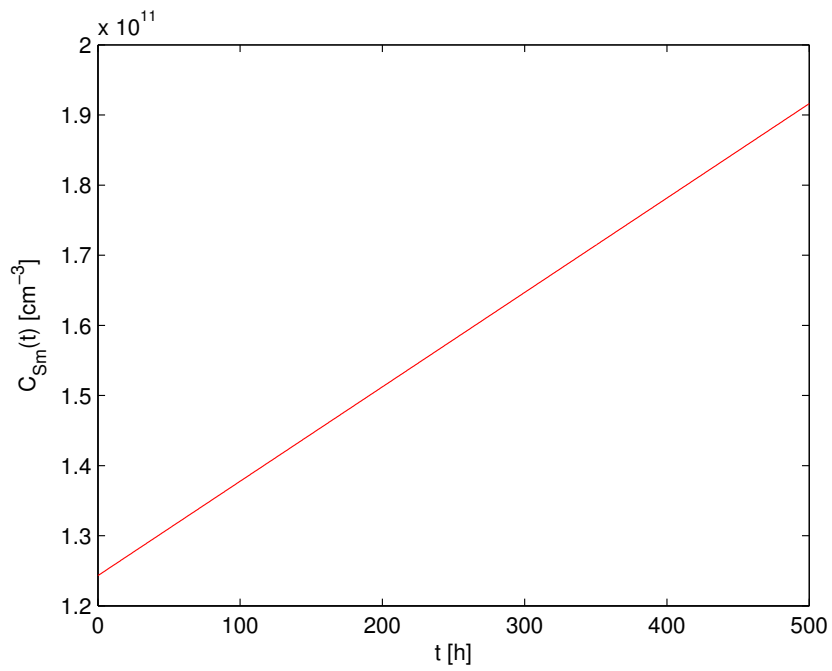


Figura 4.36: Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$ em um reator com elementos reutilizados.

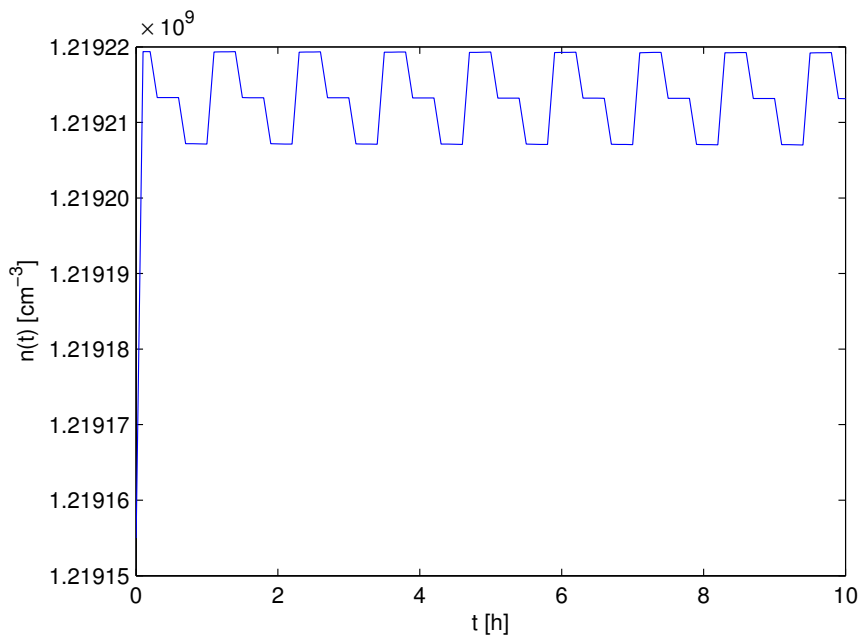


Figura 4.37: $n(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

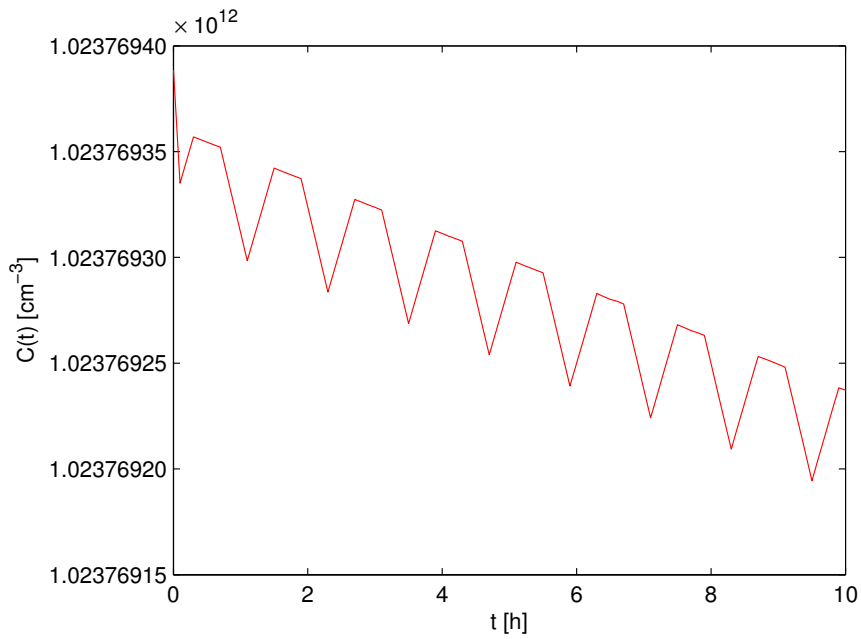


Figura 4.38: $C(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

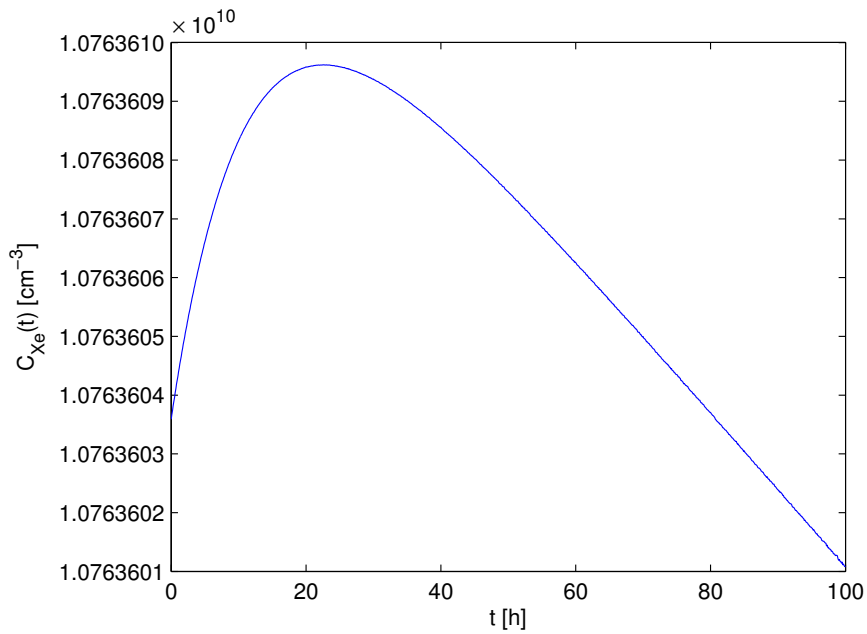


Figura 4.39: $C_{Xe}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

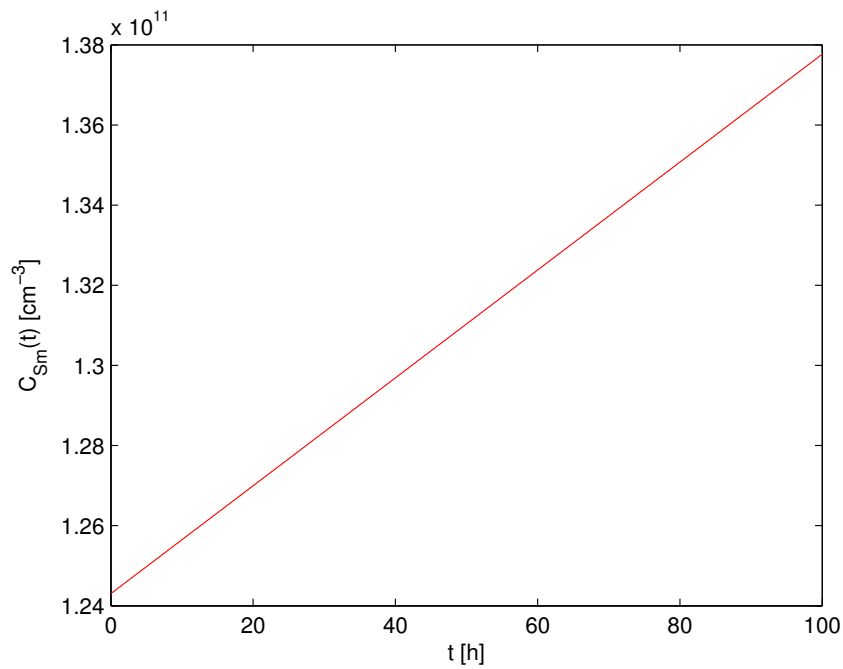


Figura 4.40: $C_{Sm}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

Para o caso em que a reatividade era constante e negativa, os resultados seguiram o perfil físico esperado, similar ao reator quando apenas elementos novos eram utilizados. Nesse caso, havia somente acúmulo de Samário no reator, isto é, o único veneno que iniciava diferente de zero. É observado que a densidade de nêutrons é menor devido a captura pelo Samário.

Para o caso em que a reatividade é do tipo linear, nota-se um resultado inesperado para concentração de Xenônio quando a reatividade é positiva. C_{Xe} decai e após começa a crescer. Isso ocorre devido ao fato de que para esse tipo de reatividade o elemento Iodo não decai mais devagar comparado ao caso em que a reatividade é constante negativa. Quando a reatividade é linear e negativa, C_{Xe} decresce mais rapidamente, comparado ao mesmo caso somente com elementos novos. As outras concentrações seguem o mesmo perfil de quando temos apenas elementos novos no reator.

Cabe ressaltar a defasagem inicial que ocorre entre $n(t)$ e $C(t)$ para os casos em que a reatividade oscila (periódica e definida por partes). Ambos crescem ou decrescem, no entanto, com inclinação diferente. Isso ocorre devido as escalas de tempo entre $n(t)$ e

$C(t)$ serem diferentes. As concentrações de Xenônio e Samário também possuem flutuações quando a reatividade é oscilante, porém, devido suas escalas serem maiores, o perfil das concentrações têm forma suave.

Os casos onde a reatividade é oscilante mostram que $C_{Xe} < C_{Sm}$ para t pequeno. Ao fazer comparação das constantes de meia-vida, nota-se que a concentração de Samário no final da cadeia do Promécio é muito maior que a concentração de Xenônio no final da cadeia do Iodo. Com isso, a ideia é que o que seja produzido mais rápido seja o Xenônio e que seu valor esteja acima da concentração de Samário para t pequeno, pelas escalas de tempo. No entanto, devido a não-linearidade do problema obtém-se o oposto. De fato, pode-se mostrar que existem combinações ao fazer desigualdades que realmente a concentração de Xenônio pode ser inferior a concentração de Samário.

A alteração da reatividade provocada por uma força externa (reatores nucleares apoiados por aceleradores) pode ser exemplificada através de uma reatividade oscilante, controlando a quantidade nêutrons para dado período de tempo. Ao invés de utilizar um termo fonte, utiliza-se $\rho_c(t)$ periódica. Logo, nota-se a importância de gerar resultados para esse tipo de reatividade, além de mostrar fisicamente a consistência e a validade da implementação.

4.4 Estabilidade do Algoritmo

Com o objetivo de analisar a estabilidade das soluções truncadas do sistema de equações onde a não linearidade é tratada através do método de Adomian, o critério utilizado é calcular a norma ℓ_∞ de cada quantidade nas linhas da matriz do sistema [Burden e Faires, 2008]. Analisa-se também a diferença das aproximações sucessivas $Y_j - Y_{j-1}$ para cada recursão de $j = 1$ até $j = 9$. As Tabelas 4.2 e 4.3 mostram as normas para cada termo das concentrações $n(t)$, $C(t)$, $C_I(t)$, $C_{Xe}(t)$, $C_{Pm}(t)$ e $C_{Sm}(t)$. Por inspeção, é observado que com o aumento de j as contribuições decrescem monotonicamente. Além disso, a norma da diferença dos termos subsequentes também está diminuindo, o que torna mais plausível para uma solução que é convergente [Rudin, 1976]. Isso também é apoiado por uma análise da física subjacente do fenômeno considerado.

Cabe salientar que o presente método não impõe restrições sobre intervalos de tempo, uma vez que o método da decomposição determina a solução para cada tempo independen-

temente dos tempos anteriores e, portanto, deve funcionar para a intervalos curtos de tempo da mesma maneira que para intervalos longos de tempo independente de qualquer escalas de tempo do problema, tais como meias-vidas ou constantes de tempo relacionados com cenários onde a reatividade possui termos de curta escala.

Na Tabela 4.2 tem-se a norma ℓ_∞ para a diferença de cada aproximação sucessiva $Y_j - Y_{j-1}$ de cada linha da matriz Y_j . Na Tabela 4.3 tem-se a norma ℓ_∞ para cada concentração $n(t)$, $C(t)$, $C_I(t)$, $C_{Xe}(t)$, $C_{Pm}(t)$ e $C_{Sm}(t)$.

Tabela 4.2: Norma ℓ_∞ da diferença das aproximações sucessivas de n , C , C_I , C_{Xe} , C_{Pm} e C_{Sm}

	$\ n_j - n_{j-1}\ _\infty$	$\ C_j - C_{j-1}\ _\infty$	$\ C_I_j - C_I_{j-1}\ _\infty$	$\ CX_{e_j} - CX_{e_{j-1}}\ _\infty$	$\ CP_{m_j} - CP_{m_{j-1}}\ _\infty$	$\ CS_{m_j} - CS_{m_{j-1}}\ _\infty$
j=1	38574406402,2230	32390704932760,6	234773740206,583	340554763706,219	326267667795,264	5035355548319,20
j=2	715442,158888911	110105523,223794	774288,787892851	5197233,88327218	859272,043636799	22704492,9623802
j=3	33,2903123653916	15802,4542424042	111,302056997461	240,793175039567	124,427227444841	438,950369973786
j=4	0,000883809562842815	0,234923532737599	0,00163983287234541	0,00900605971566221	0,00174497801627874	0,0192587602758154
j=5	4,04283811906419e-08	1,64085710243987e-05	1,14545340966174e-07	4,00949359118684e-07	1,22097697123991e-07	5,51746138938033e-07
j=6	1,37598597485268e-12	4,16871976012037e-10	2,88722739782079e-12	1,735444345542109e-11	2,95039133796606e-12	2,28423274971850e-11
j=7	6,16239859430884e-17	2,14875998246865e-14	1,48618811036628e-16	7,83732707854552e-16	1,51030203026716e-16	7,88928326748081e-16
j=8	2,47069352143591e-21	7,39098808084842e-19	5,07720675093148e-21	3,39681234276107e-20	4,98145507093031e-21	3,23519198357244e-20
j=9	1,10869470100579e-25	3,38816448070486e-23	2,32095913998530e-25	1,87633549931839e-21	2,24867756426329e-25	1,24975169630848e-24

Tabela 4.3: Norma ℓ_∞ das aproximações sucessivas de n , C , C_I , C_{Xe} , C_{Pm} e C_{Sm}

	$\ n_j\ _\infty$	$\ C_j\ _\infty$	$\ C_I_j\ _\infty$	$\ CX_{e_j}\ _\infty$	$\ CP_{m_j}\ _\infty$	$\ CS_{m_j}\ _\infty$
j=0	1219213899,83762	1023769388547,12	7420469620,62336	10763748515,5556	10312314928,5415	191613028946,837
j=1	40992,5419940679	6328343,02703235	43890,6181121287	199352,946731573	52223,2824629356	1351313,39131417
j=2	2,21012857960107	874,390011535878	6,23199678518884	12,8044173525179	7,43744752739400	32,2510974415553
j=3	8,34032333292040e-05	0,0149816971415526	0,000105222589969012	0,000497396882509631	0,000118355577276372	0,00136359590857859
j=4	3,83877802282230e-09	1,04159326002341e-06	7,36642653882695e-09	2,48396293310750e-08	8,26043592904601e-09	4,31674364395475e-08
j=5	1,59024053493145e-13	2,90132998451927e-11	2,04459726462767e-13	1,13769261163195e-12	2,18731412858318e-13	1,79222709055574e-12
j=6	7,21720495957229e-18	1,52415360021335e-15	1,06958662440389e-17	5,51208143549790e-17	1,13332948497226e-17	6,57373617329252e-17
j=7	3,21174182913055e-22	5,60513076998777e-20	3,91601431890893e-22	2,65219847601359e-21	3,99667111492991e-22	2,74792605187811e-21
j=8	1,49400198814284e-26	2,66328315913198e-24	1,85372048332099e-26	1,46175061822268e-22	1,86210060006032e-26	1,10885507971403e-25
j=9	6,07169331551223e-29	2,22932782375867e-26	1,53751351307520e-28	1,77194339328345e-27	1,53390210979951e-28	2,53018207553564e-28

5 CINÉTICA ESPACIAL

Neste capítulo desenvolve-se uma solução para um modelo de sistema homogenizado que será o primeiro passo para resolver o problema espacial em geometria cartesiana onde tem-se elementos de combustível até a terceira geração. Cabe ressaltar que a parte da cinética espacial é de grande importância quando leva-se em consideração o recarregamento do reator nuclear, onde a distribuição combinatorial de elementos de combustíveis até a terceira geração devem gerar a um máximo possível um fluxo escalar homogêneo.

Considere o sistema que modela o problema de cinética de difusão de nêutrons unidimensional para o caso monoenergético, com um grupo de precursores de nêutrons atrasados e acoplada as equações dos venenos produtos de fissão

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(x, t) &= [D\nabla^2 - \Sigma_a + (1 - \beta)\nu\Sigma_f] \phi(x, t) + \lambda C(x, t) \\
 &\quad - \sigma_{Xe} C_{Xe}(x, t) \phi(x, t) - \sigma_{Sm} C_{Sm}(x, t) \phi(x, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} C(x, t) &= \beta\nu\Sigma_f \phi(x, t) - \lambda C(x, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} C_I(x, t) &= \gamma_I \Sigma_f \phi(x, t) - \lambda_I C_I(x, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} C_{Xe}(x, t) &= \gamma_{Xe} \Sigma_f \phi(x, t) + \lambda_I C_I(x, t) - \lambda_{Xe} C_{Xe}(x, t) \\
 &\quad - \sigma_{Xe} C_{Xe}(x, t) \phi(x, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} C_{Pm}(x, t) &= \gamma_{Pm} \Sigma_f \phi(x, t) - \lambda_{Pm} C_{Pm}(x, t) \\
 \frac{\partial}{\partial t} C_{Sm}(x, t) &= \lambda_{Pm} C_{Pm}(x, t) - \sigma_{Sm} C_{Sm}(x, t) \phi(x, t)
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

O conjunto de equações diferenciais parciais (5.1) compõe o sistema de cinética espacial com efeitos dos venenos produtos de fissão e é classificado como um sistema não linear rígido. A não linearidade ocorre na primeira, quarta e sexta equações (em ϕ , C_{Xe} e C_{Sm}) e são do tipo produto, entre o fluxo de nêutrons e as concentrações de Xenônio e Samário. A rigidez do sistema se dá devido a diferença das ordens de grandeza das reações nucleares de cada elemento, além do tempo estar caracterizado em longa escala, comparado as reações de poucos segundos.

No modelo proposto é observado cenários em duas escalas de tempo, onde para a seção de choque de absorção Σ_a são atribuídas todas as contribuições relacionadas com a operação do reator (escala curta de tempo). A escala longa de tempo deve-se a dinâmica intrínseca do reator, ou seja, os efeitos dos venenos.

Nesse capítulo, o objetivo é fazer um estudo sobre a metodologia aplicada para a resolução do problema de difusão de nêutrons unidimensional para o caso monoenergético considerando um grupo de precursores e venenos produtos de fissão. Busca-se determinar soluções não triviais para $\phi(x, t)$, $C(x, t)$, $C_I(x, t)$, $C_{Xe}(x, t)$, $C_{Pm}(x, t)$ e $C_{Sm}(x, t)$, que representam respectivamente o fluxo escalar de nêutrons, a concentração de precursores e as concentrações de venenos produtos de fissão na posição x e no tempo t .

5.1 Metodologia Aplicada

O problema de valor de contorno e valor inicial relacionado ao sistema (5.1) pode ser escrito como

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}(x, t) & = \mathbf{L}\mathbf{u}(x, t) + \mathbf{N}\mathbf{u}(x, t) \\ \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{u}(0, t) = \mathbf{u}(L, t) & = 0, \quad t > 0 \\ \mathbf{u}(x, 0) & = \mathbf{f}(x), \quad 0 < x < L \end{cases} \quad (5.2)$$

onde $\mathbf{u}(x, t)$ é dado por

$$\mathbf{u}(x, t) = \begin{bmatrix} \phi(x, t) \\ C(x, t) \\ (C_I)(x, t) \\ (C_{Xe})(x, t) \\ (C_{Pm})(x, t) \\ (C_{Sm})(x, t) \end{bmatrix}, \quad (5.3)$$

$$\mathbf{Lu} = \begin{bmatrix} [D\nabla^2 - \Sigma_a + (1 - \beta)\nu\Sigma_f] \phi(x, t) + \lambda C(x, t) \\ \beta\nu\Sigma_f\phi(x, t) - \lambda C(x, t) \\ \gamma_I\Sigma_f\phi(x, t) - \lambda_I C_I(x, t) \\ \gamma_{Xe}\Sigma_f\phi(x, t) + \lambda_I C_I(x, t) - \lambda_{Xe}C_{Xe}(x, t) \\ \gamma_{Pm}\Sigma_f\phi(x, t) - \lambda_{Pm}C_{Pm}(x, t) \\ \lambda_{Pm}C_{Pm}(x, t) \end{bmatrix}, \quad (5.4)$$

e

$$\mathbf{Nu} = \begin{bmatrix} -\sigma_{Xe}\phi(x, t)C_{Xe}(x, t) - \sigma_{Sm}\phi(x, t)C_{Sm}(x, t) \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma_{Xe}\phi(x, t)C_{Xe}(x, t) \\ 0 \\ -\sigma_{Sm}\phi(x, t)C_{Sm}(x, t) \end{bmatrix}. \quad (5.5)$$

A técnica proposta para a resolução do problema de valor de contorno e valor inicial (5.2) consiste em utilizar o método da decomposição de Adomian. Com o objetivo de resolver um sistema recursivo, decompõe-se o sistema como a soma de uma parte linear e outra parte não-linear, dadas respectivamente por (5.4) e (5.5). O primeiro passo consiste em resolver o sistema linear com condições iniciais não-homogêneas. O segundo passo consiste em resolver o sistema completo, sujeito a condições iniciais e de contorno homogêneas. A parte não linear é tratada como polinômios de Adomian e depende somente das recursões anteriores. Com isso, para cada recursão obtém-se um sistema com termo fonte. A resolução de cada esquema recursivo é resolvido através do método de separação de variáveis.

5.1.1 Passo zero: Resolvendo o sistema linear

O passo zero consiste em resolver o sistema linear com condições iniciais não homogêneas. Considere o sistema linear, ou seja, sem o termo \mathbf{Nu} . Tal sistema é escrito na

forma

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_0(x, t) & = \mathbf{L} \mathbf{u}_0(x, t) \\ \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{u}(0, t) = \mathbf{u}(L, t) & = 0, \quad t > 0 \\ \mathbf{u}(x, 0) & = \mathbf{f}(x), \quad 0 < x < L \end{cases} \quad (5.6)$$

Para problemas de valor de contorno como (5.6) em coordenadas retangulares, isto é, no plano cartesiano em x e t , sempre haverá um problema de autovalor associado com a parte espacial x [Boyce e DiPrima, 2001], [Özisik, 1974]. Nesse caso, o problema de autovalores vem do Laplaciano (∇^2) que aparece apenas na primeira equação. Ao resolver o problema de autovalores, expande-se todas as funções que estão no intervalo $[0, L]$ da mesma forma, uma vez que as condições de contorno impostas para todas são as mesmas. Após isso, o restante será a parte temporal, formando um sistema de equações diferenciais ordinárias em t . Nesse caso, com as condições de contorno supracitadas, $\mathbf{u}_0(x, t)$ pode ser expresso da seguinte forma

$$\mathbf{u}_0(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \mathbf{T}_k^0(t), \quad (5.7)$$

onde $X_k(x)$ são as autofunções associadas ao problema de contorno. Cabe ressaltar que $X_k(x)$ é escalar, uma vez que a base de autofunções é a mesma para todas as equações que compõem o sistema de interesse.

Substituindo (5.7) em (5.6) obtém-se

$$\sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \frac{d}{dt} \mathbf{T}_k^0(t) = \sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \mathbf{L}_k \mathbf{T}_k^0(t), \quad (5.8)$$

na qual segue que $\mathbf{T}_k^0(t)$ deve ser solução do sistema de equações diferenciais ordinárias expresso em forma matricial como

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \mathbf{T}_k^0 & = \mathbf{L}_k \mathbf{T}_k^0 \\ \mathbf{T}_k^0(0) & = \mathbf{T}_k^I \end{cases}, \quad (5.9)$$

onde $\mathbf{T}_k^0(0)$ é o vetor das condições iniciais, formados pelos coeficientes de Fourier, dado por

$$\mathbf{T}_k^0(0) = \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) \mathbf{f}(x) dx. \quad (5.10)$$

O sistema de EDO's (5.9) tem solução dada por [Boyce e DiPrima, 2001]

$$\mathbf{T}_k^0(t) = \exp(\mathbf{L}_k t) \mathbf{T}_k^0(0). \quad (5.11)$$

A próxima etapa da recursão zero é montar o produto das funções em x e t [Özsisik, 1974], [Boyce e DiPrima, 2001]. Seja $X_k(x)$ a base de autofunções que depende das condições de contorno do problema, e para cada k tome o produto de $X_k(x)$ pelo termo correspondente de $\mathbf{T}_k^0(t)$. Dessa forma tem-se

$$\mathbf{u}_k^0(x, t) = X_k(x) \mathbf{T}_k^0(t). \quad (5.12)$$

Logo, a solução para o problema (5.6) é dada como

$$\mathbf{u}^0(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{u}_k^0(x, t). \quad (5.13)$$

5.1.2 Recursões subsequentes: sistema linear com fonte

Para os passos subsequentes ao passo zero, faz-se uso de um esquema recursivo para a resolução de um sistema linear com termo fonte utilizando condições iniciais homogêneas, onde as não linearidades são expressas como polinômios através do método de Adomian [Adomian, 1988], [Adomian, 1994].

O sistema linear com fonte pode ser expresso como

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{u}_j(x, t) & = \mathbf{L} \mathbf{u}_j(x, t) + \mathbf{F}^{j-1}(x, t) \\ \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{u}(0, t) = \mathbf{u}(L, t) & = \mathbf{0}, \quad t > 0 \\ \mathbf{u}_j(x, 0) & = \mathbf{0} \end{cases}. \quad (5.14)$$

Supõe-se que

$$\mathbf{u}_j(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \mathbf{T}_k^j(t) \quad (5.15)$$

e

$$\mathbf{F}^{j-1}(x, t) = \sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \mathbf{F}_k^{j-1}(t), \quad (5.16)$$

onde $\mathbf{F}_k^{j-1}(t)$ é o vetor do termo fonte obtido pelo método da decomposição de Adomian.

Substituindo (5.15) e (5.16) em (5.14) obtém-se

$$\sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \frac{d}{dt} \mathbf{T}_k^j(t) = \sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \mathbf{L}_k \mathbf{T}_k^j(t) + \sum_{k=0}^{\infty} X_k(x) \mathbf{F}_k(t). \quad (5.17)$$

Portanto, para a recursão j , resolve-se o sistema de equações diferenciais com termo fonte

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \mathbf{T}_k^j(t) = \mathbf{L}_k \mathbf{T}_k^j(t) + \mathbf{F}_k^{j-1}(t) \\ \mathbf{T}_k^j(0) = \mathbf{0} \end{cases} \quad (5.18)$$

onde $\mathbf{L}_k \mathbf{T}_k^j(t)$ é o termo linear e $\mathbf{F}_k^{j-1}(t)$ é o termo fonte obtido pelo método da decomposição de Adomian, que depende apenas das recursões anteriores ($\mathbf{T}_k^0(t)$, $\mathbf{T}_k^1(t)$, ..., $\mathbf{T}_k^{j-1}(t)$).

A solução para esse sistema é dada analiticamente [Boyce e DiPrima, 2001] por

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_k^j(t) &= \exp(\mathbf{L}_k t) \mathbf{T}_k^j(0) + \int_0^t \exp(\mathbf{L}_k(t - \tau)) \mathbf{F}_k^{j-1}(\tau) d\tau \\ &= \int_0^t \exp(\mathbf{L}_k(t - \tau)) \mathbf{F}_k^{j-1}(\tau) d\tau, \end{aligned} \quad (5.19)$$

onde

$$\mathbf{F}_{\mathbf{k}}^{j-1}(\tau) = \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) \mathbf{F}_{\mathbf{k}}^{j-1}(x, \tau) dx = \begin{bmatrix} \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,1}^{j-1}(x, \tau) dx \\ \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,2}^{j-1}(x, \tau) dx \\ \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,3}^{j-1}(x, \tau) dx \\ \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,4}^{j-1}(x, \tau) dx \\ \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,5}^{j-1}(x, \tau) dx \\ \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,6}^{j-1}(x, \tau) dx \end{bmatrix} \quad (5.20)$$

com $F_{k,i}^{j-1}$ provenientes da decomposição de Adomian. Cabe ressaltar que para poder utilizar a fórmula de Duhamel na Equação (5.19) necessita-se colocar a matriz exponencial na forma diagonal para depois calcular as integrais. Observa-se que somente $F_{k,1}^j$, $F_{k,4}^j$ e $F_{k,6}^j$ são diferentes de zero no problema, devido a não-linearidade das equações, isto é,

$$\mathbf{F}_{\mathbf{k}}^{j-1}(\tau) = \begin{bmatrix} \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,1}^j(x, \tau) dx \\ 0 \\ 0 \\ \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,4}^j(x, \tau) dx \\ 0 \\ \frac{2}{L} \int_0^L X_k(x) F_{k,6}^j(x, \tau) dx \end{bmatrix}. \quad (5.21)$$

Agora, monta-se o produto das funções em x e t . Tem-se que

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}^j(x, t) = X_k(x) \mathbf{T}_{\mathbf{k}}^j(t). \quad (5.22)$$

Portanto, a solução para o problema (5.14) é dada por

$$\mathbf{u}_{\mathbf{j}}(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}^j(x, t). \quad (5.23)$$

O vetor solução \mathbf{u} para o problema de valor de contorno e valor inicial (5.2) é encontrado ao expandirmos a série infinita

$$\mathbf{u}(x, t) = \sum_{j=0}^{\infty} \mathbf{u}_j(x, t). \quad (5.24)$$

5.1.3 Polinômios de Adomian para o caso espacial

Para montar os polinômios de Adomian utiliza-se o algoritmo que pode ser estendido para o cálculo dos polinômios de Adomian em várias variáveis, [Biazar, 2007]. O método da Decomposição de Adomian é uma técnica para resolver sistemas da forma

$$u = L(u) + N(\phi, C_i), \quad (5.25)$$

onde a solução u é expressa como

$$u = \sum_{i=0}^{\infty} u_i \quad (5.26)$$

e a parte não linear $N(\phi, C^i)$ é decomposta como um somatório de polinômios funcionais

$$N(\phi, C^i) = \sum_{i=0}^{\infty} A_j^i, \quad (5.27)$$

onde A_j^i são os chamados polinômios de Adomian da recursão j dados pela Equação (A.7) (ver Apêndice A).

O sistema que compõe este trabalho possui não linearidades da forma $C_{Xe}(x, t)\phi(x, t)$ e $C_{Sm}(x, t)\phi(x, t)$, que representam o desaparecimento dos núclídeos (Xenônio ou Samário) através da captura de nêutrons. Uma vez que a construção dos polinômios para os núclídeos são similares, mostram-se os polinômios de Adomian para o caso geral dos termos não lineares do sistema podem ser escritos como

$$N(C_i, \phi) = C_i\phi, \quad (5.28)$$

sendo C_i a concentração isotópica do nuclídeo i , onde i é ou Xenônio ou Samário, e ϕ sendo o fluxo de nêutrons.

Portanto, os polinômios de Adomian para não linearidades do tipo $C_i\phi$ são da forma

$$\begin{aligned}
A_0^i &= N(C_i^0, \phi_0) = C_i^0 \phi_0, \\
A_1^i &= \frac{d}{d\omega} ((C_i^0 + C_i^1 \omega)(\phi_0 + \phi_1 \omega))|_{\omega=0} = C_i^0 \phi_1 + C_i^1 \phi_0, \\
A_2^i &= \frac{1}{2} \frac{d}{d\omega} ((C_i^1 + 2C_i^2 \omega)(\phi_0 + \phi_1 \omega) + (C_i^0 + C_i^1 \omega)(\phi_1 + 2\phi_2 \omega))|_{\omega=0} \\
&= C_i^0 \phi_2 + C_i^1 \phi_1 + C_i^2 \phi_0, \\
A_3^i &= \frac{1}{3!} \frac{d}{d\omega} ((C_i^2 + 3C_i^3 \omega)(\phi_0 + \phi_1 \omega) + (C_i^1 + 2C_i^2 \omega)(\phi_1 + 2\phi_2 \omega) + \\
&+ (C_i^0 + C_i^1 \omega)(\phi_2 + 3\phi_3 \omega))|_{\omega=0} = C_i^3 \phi_0 + C_i^2 \phi_1 + C_i^1 \phi_2 + C_i^0 \phi_3.
\end{aligned}$$

Analogamente, utilizando (A.7) tem-se

$$\begin{aligned}
A_4^i &= C_i^4 \phi_0 + C_i^3 \phi_1 + C_i^2 \phi_2 + C_i^1 \phi_3 + C_i^0 \phi_4, \\
A_5^i &= C_i^5 \phi_0 + C_i^4 \phi_1 + C_i^3 \phi_2 + C_i^2 \phi_3 + C_i^1 \phi_4 + C_i^0 \phi_5, \\
A_6^i &= C_i^6 \phi_0 + C_i^5 \phi_1 + C_i^4 \phi_2 + C_i^3 \phi_3 + C_i^2 \phi_4 + C_i^1 \phi_5 + C_i^0 \phi_6, \\
A_7^i &= C_i^7 \phi_0 + C_i^6 \phi_1 + C_i^5 \phi_2 + C_i^4 \phi_3 + C_i^3 \phi_4 + C_i^2 \phi_5 + C_i^1 \phi_6 + C_i^0 \phi_7, \\
A_8^i &= C_i^8 \phi_0 + C_i^7 \phi_1 + C_i^6 \phi_2 + C_i^5 \phi_3 + C_i^4 \phi_4 + C_i^3 \phi_5 + C_i^2 \phi_6 + C_i^1 \phi_7 \\
&+ C_i^0 \phi_8, \\
A_9^i &= C_i^9 \phi_0 + C_i^8 \phi_1 + C_i^7 \phi_2 + C_i^6 \phi_3 + C_i^5 \phi_4 + C_i^4 \phi_5 + C_i^3 \phi_6 + C_i^2 \phi_7 + \\
&+ C_i^1 \phi_8 + C_i^0 \phi_9.
\end{aligned} \tag{5.29}$$

O polinômio A_j^i onde j é a j -ésima recursão e i representa a não linearidade entre o fluxo de nêutrons e o nuclídeo i é dado por

$$A_j^i = \sum_{k=0}^j C_i^{j-k} \phi_k. \tag{5.30}$$

Desta forma, pode-se escrever \mathbf{F}_k^0 como

$$\mathbf{F}_k^0 = \begin{bmatrix} -\sigma_{Xe} C_{Xe}^0(x, t) \phi_0(x, t) - \sigma_{Sm} \phi_0(x, t) C_{Sm}^0(x, t) \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma_{Xe} \phi_0(x, t) C_{Xe}^0(x, t) \\ 0 \\ -\sigma_{Sm} \phi_0(x, t) C_{Sm}^0(x, t) \end{bmatrix}, \quad (5.31)$$

onde C_{Xe}^0 , C_{Sm}^0 e ϕ_0 representam a solução do passo zero encontrada ao resolver o sistema linear. Para as iterações sucessivas encontram-se termos obtidos através da resolução do sistema com fonte. Assim, $\mathbf{F}_k^j(x, t)$ pode ser escrito como

$$\mathbf{F}_k^j(x, t) = \begin{bmatrix} -\sigma_{Xe} A_j^{Xe} - \sigma_{Sm} A_j^{Sm} \\ 0 \\ 0 \\ -\sigma_{Xe} A_j^{Xe} \\ 0 \\ -\sigma_{Sm} A_j^{Sm} \end{bmatrix}. \quad (5.32)$$

6 RESULTADOS NUMÉRICOS: CINÉTICA ESPACIAL

Apresentam-se resultados utilizando o método da decomposição de Adomian e técnicas numéricas previamente apresentadas a fim de resolver o sistema de equações parciais não lineares que modelam o problema de cinética de difusão de nêutrons unidimensional para o caso monoenergético, com um grupo de precursores de nêutrons atrasados e acoplada as equações dos venenos produtos de fissão. A não linearidade foi expandida através de arranjos da série de Taylor que dependem apenas dos passos anteriores. Utiliza-se 5 aproximações para as não linearidades, isto é, 5 passos recursivos para o sistema linear com fonte.

As condições iniciais utilizadas para um reator com elementos de combustíveis novos, onde o fluxo inicial é dado em $[cm^{-2}h^{-1}]$, e as concentrações em $[cm^{-3}]$, são

$$\begin{aligned}
 \phi(x, 0) &= 10^\alpha - \frac{10^\alpha x^2}{L^2}, \\
 C(x, 0) &= \frac{\beta \nu \Sigma_f}{\lambda} \phi_0, \\
 C_I(x, 0) &= 0, \\
 C_{Xe}(x, 0) &= 0, \\
 C_{Pm}(x, 0) &= 0, \\
 C_{Sm}(x, 0) &= 0.
 \end{aligned}
 \quad 0 \leq x \leq L$$

com $\alpha = 5$, $\alpha = 9$ e $\alpha = 14$. Como o problema é não linear, é importante simular valores iniciais diferentes, uma vez que o mesmo não necessariamente é invariante sob transformação de escala. As condições de contorno são dadas por

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dx} \phi(0, t) &= 0, & t > 0 \\
 \phi(L, t) &= 0, & t > 0
 \end{aligned}$$

As constantes físicas utilizadas para as simulações são [Nichols et al., 2008]

$$\begin{array}{llll}
 \bar{\beta} = 0,0065, & \gamma_I = 0,0629, & \lambda_{Xe} = 0,0762 & [h^{-1}], \\
 \nu \Sigma_f = 2,811 & [cm^{-1}], & \sigma_{Sm} = 4,1 \times 10^{-20} & [cm^2], \\
 \Lambda = 2,7778 \times 10^{-8} & [h], & \lambda_{Pm} = 0,013059 & [h^{-1}], \\
 \lambda = 278,68 & [h^{-1}], & \sigma_{Xe} = 2,6 \times 10^{-18} & [cm^2], \\
 \lambda_I = 0,1055 & [h^{-1}], & \bar{v} = 1,1035 \times 10^7 & [cm/h], & D = 0,86343 & [cm].
 \end{array}$$

Considera-se um tipo de placa plana (geometria cartesiana) para o meio homogêneo com condições de contorno dadas acima e o tamanho da placa $L = 15\text{cm}$. A série de Fourier é truncada em $k = 150$. Tem-se que $X_k(x) = \cos \frac{(2k-1)\pi}{2L}x$, onde $\chi_k = \frac{(2k-1)\pi}{2L}$ são respectivamente as autofunções e os autovalores associados ao problema de contorno.

6.1 Reator com elementos de combustível novos

Apresentam-se os resultados utilizando o modelo proposto e sua solução usando como condições iniciais elementos novos. Avalia-se o desempenho do fluxo de nêutrons, da concentração de precursores de nêutrons atrasados, da concentração de Xenônio e de Samário pra intervalo de tempo dado em hora. Gráficos da concentração de Iodo e de Promécio podem ser consultados no Apêndice.

As Figuras 6.1, 6.2, 6.3, 6.4, 6.5, 6.6, 6.7, 6.8, 6.9, 6.10, 6.11 e 6.12 mostram o comportamento do fluxo de nêutrons, da concentração de precursores de nêutrons atrasados, da concentração de Xenônio e de Samário em um reator operando somente com elementos novos com fluxo inicial na ordem de 10^{14} , 10^9 e 10^5 , respectivamente. Para tais resultados, a seção de choque de absorção macroscópica é dada por $\Sigma_a = 0,026$. Outros resultados com diferentes valores de Σ_a estão disponíveis no Apêndice desta tese.

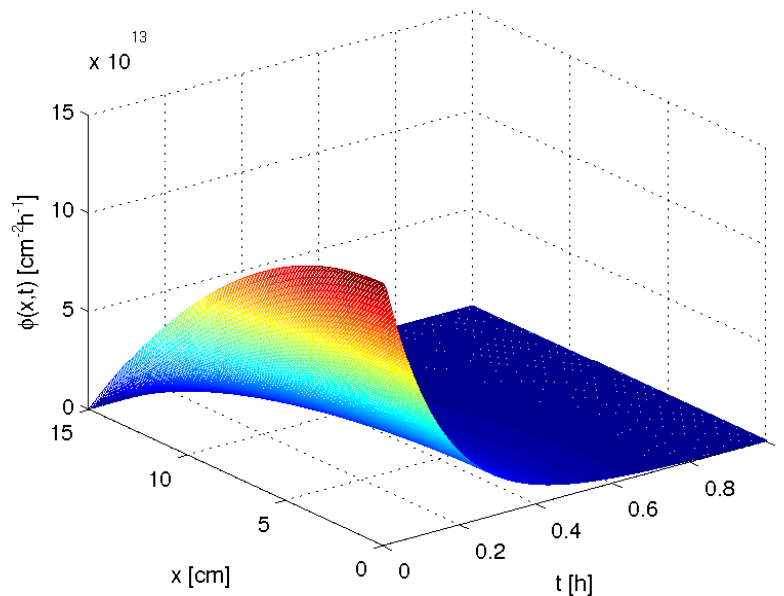


Figura 6.1: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0.026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

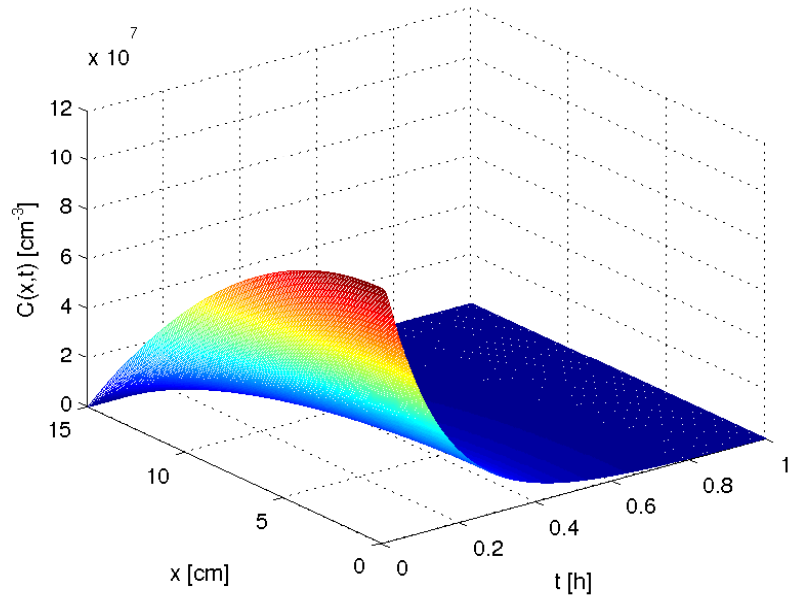


Figura 6.2: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

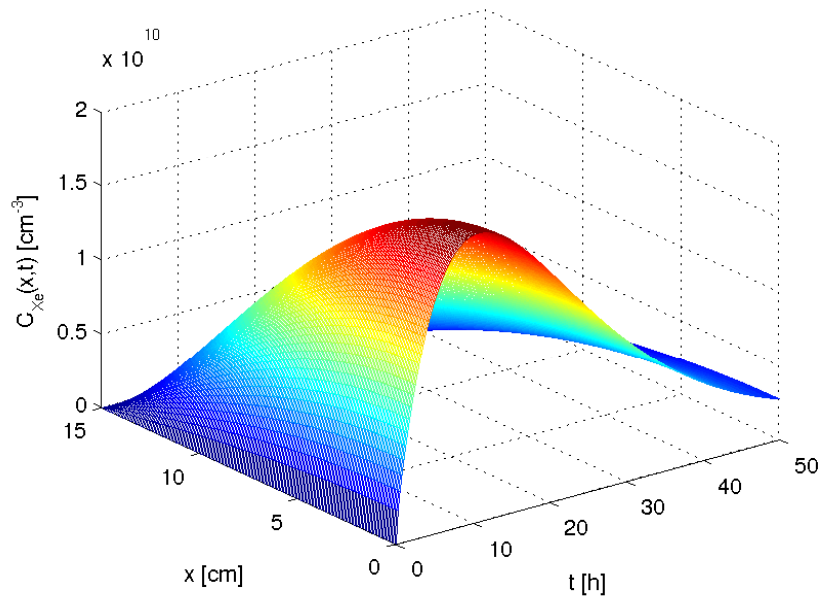


Figura 6.3: Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

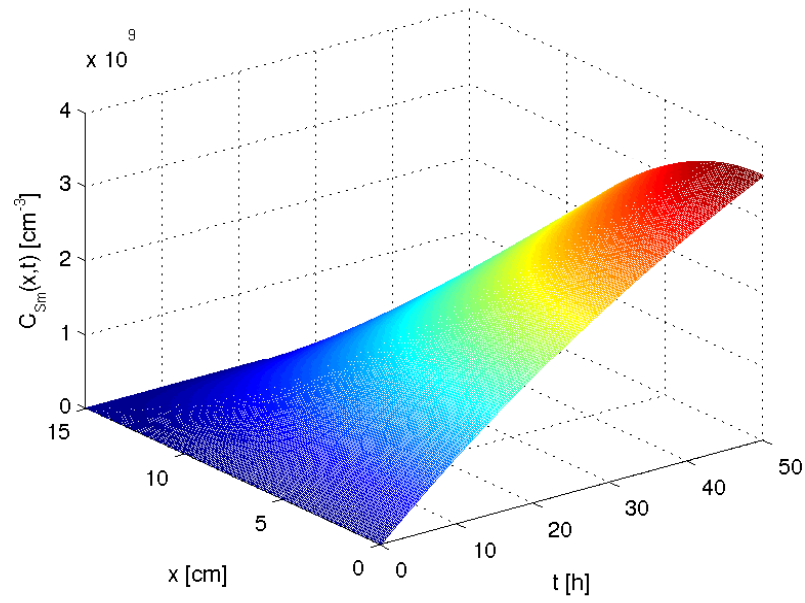


Figura 6.4: Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

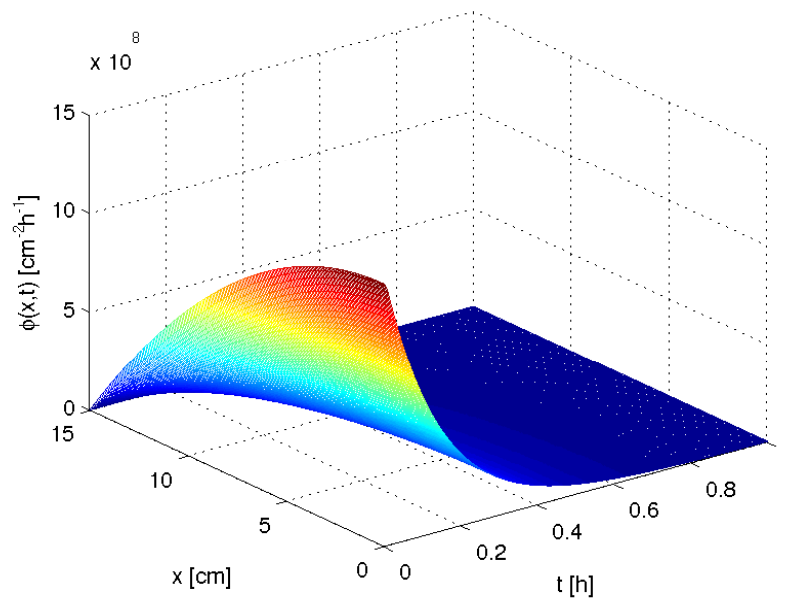


Figura 6.5: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

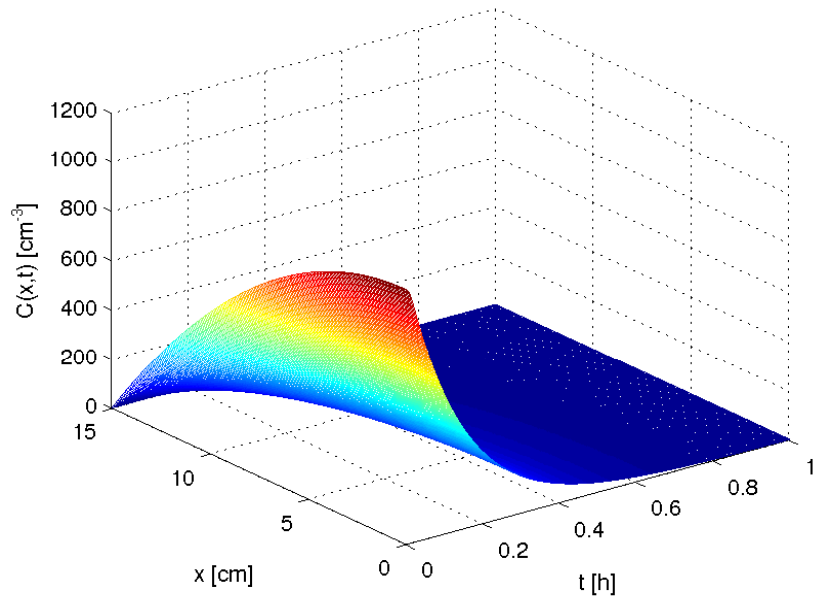


Figura 6.6: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

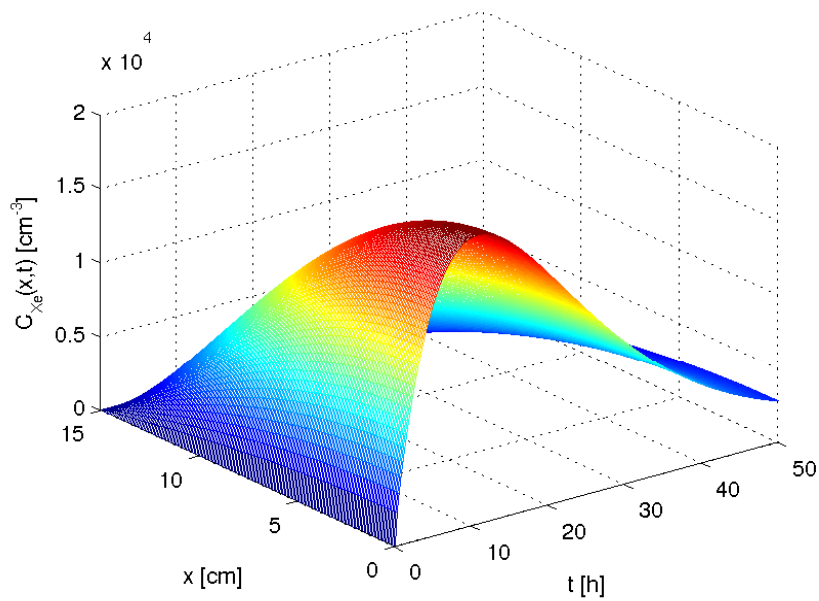


Figura 6.7: Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

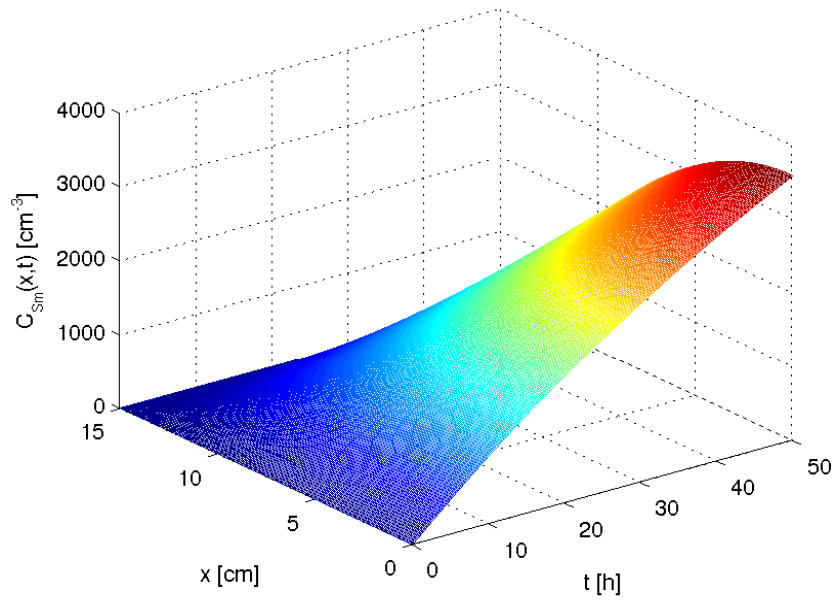


Figura 6.8: Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

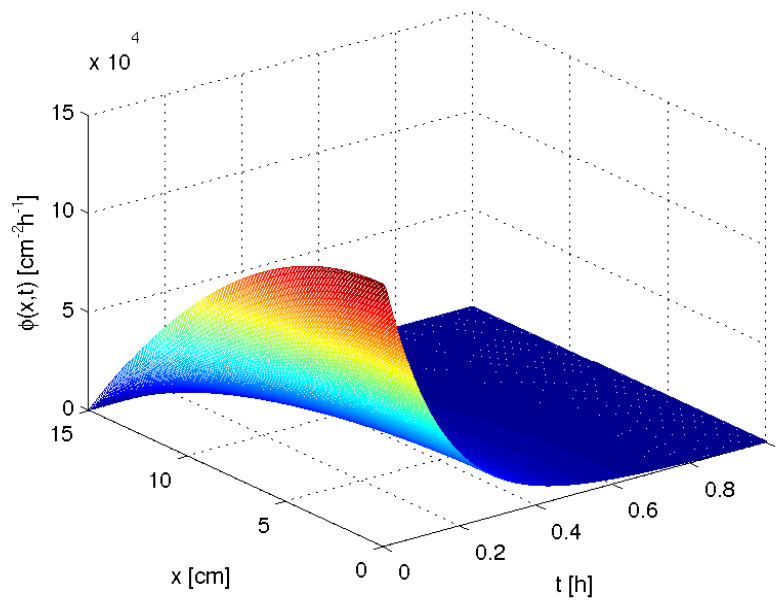


Figura 6.9: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

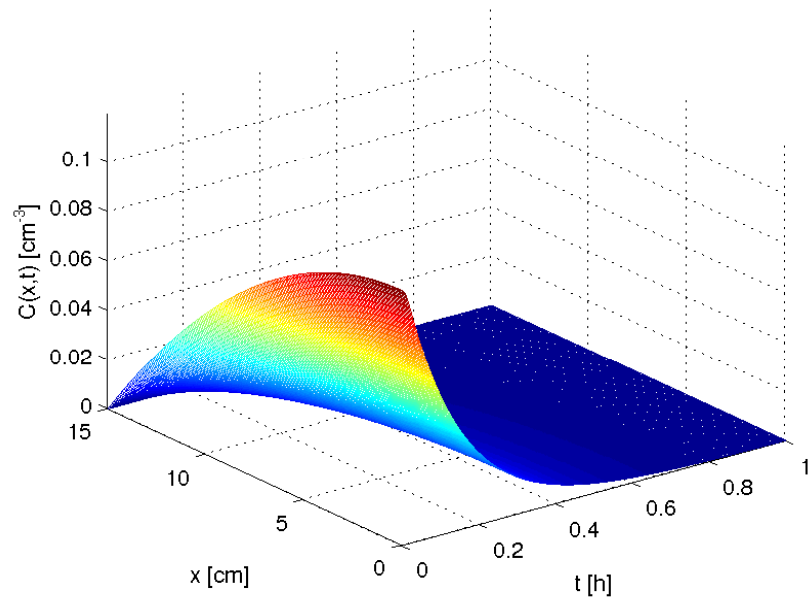


Figura 6.10: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

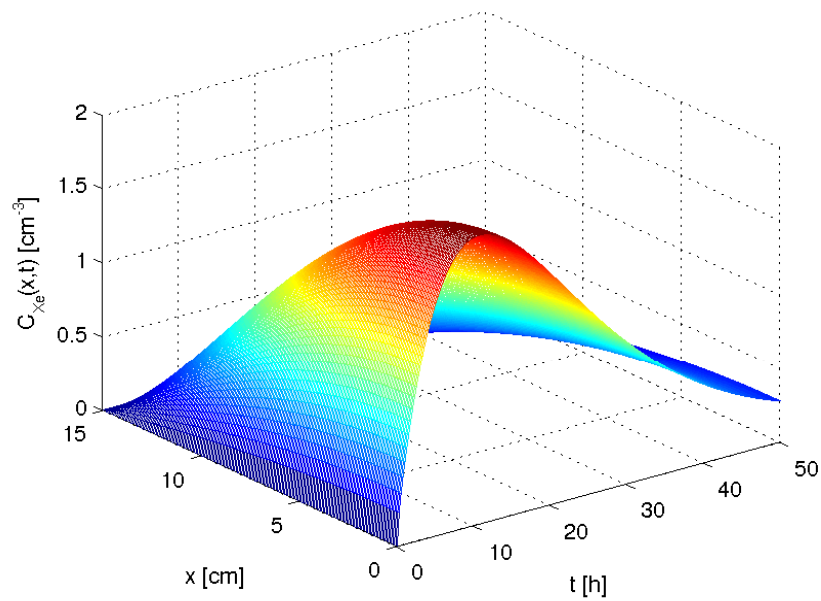


Figura 6.11: Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

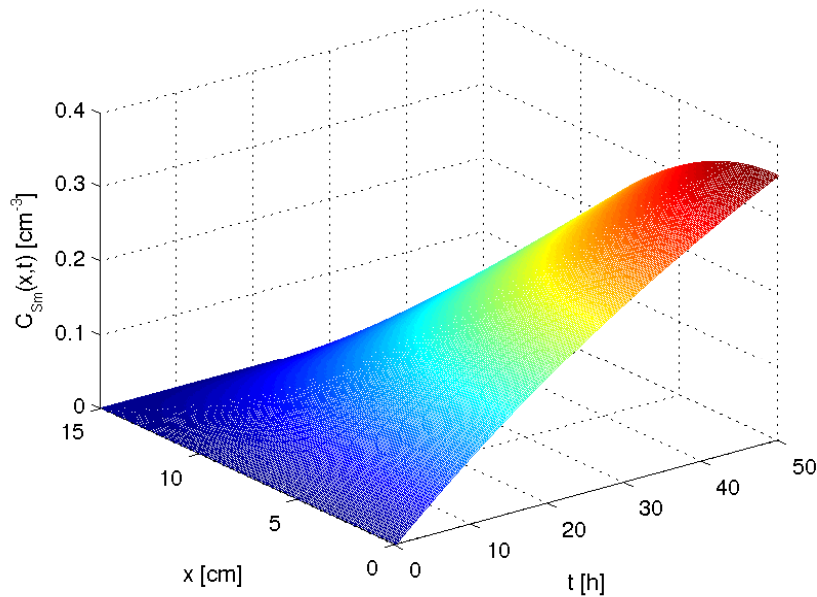


Figura 6.12: Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

As Figuras 6.13 e 6.14 mostram o comportamento do fluxo de nêutrons, da concentração de precursores de nêutrons atrasados operando com fluxo inicial de nêutrons na ordem de 10^{14} com seção de choque de absorção macroscópica dada por $\Sigma_a = 0,023$. Para valores menores ou iguais que $0,023$ observa-se que o reator torna-se fora de controle (estado supercrítico). As Figuras 6.15 e 6.16 mostram o fluxo de nêutrons e a concentração de precursores de nêutrons atrasados em um reator operando com potências iniciais na ordem de 10^{14} com $\Sigma_a = 0,024$. As Figuras 6.17 e 6.18 mostram a concentração de Xenônio e de Samário em função do tempo com $\Sigma_a = 0,026$. Como o modelo é não linear, ao utilizar condições iniciais diferentes, observa-se que embora as curvas mantenham a mesma forma, as escalas não são proporcionais.

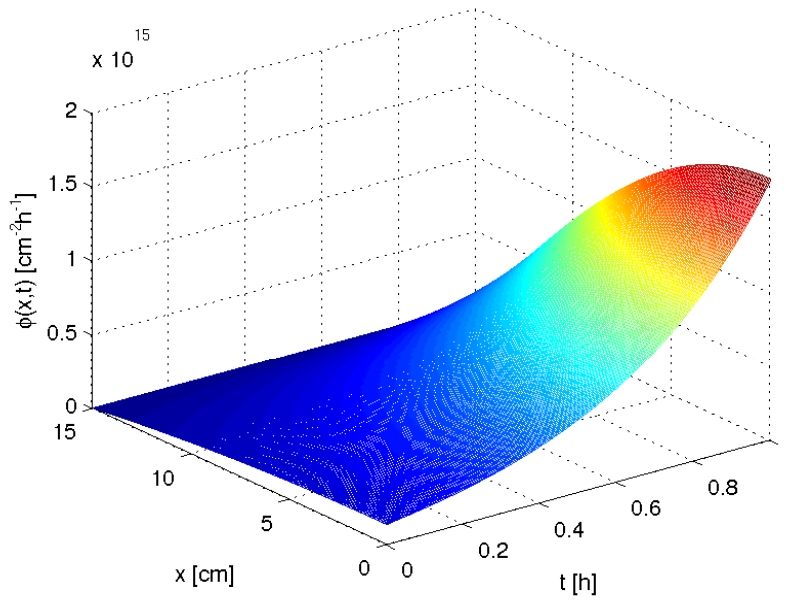


Figura 6.13: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,023$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

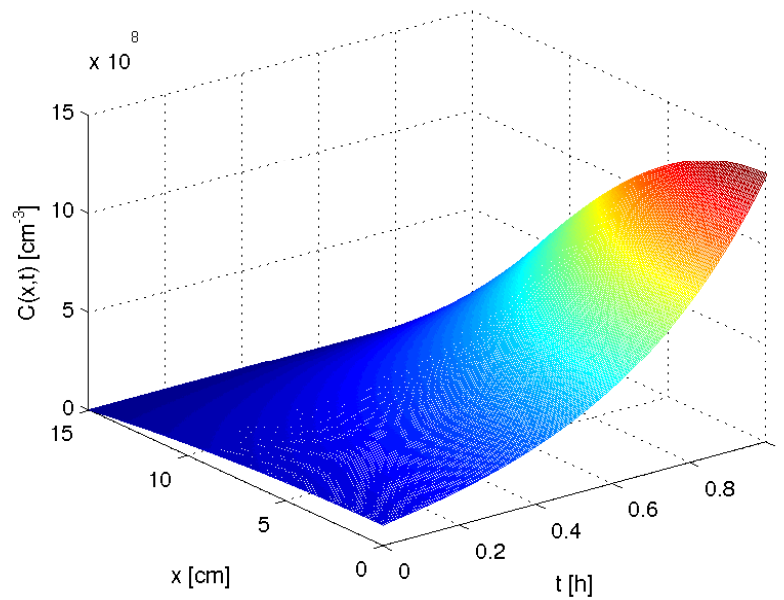


Figura 6.14: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,023$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

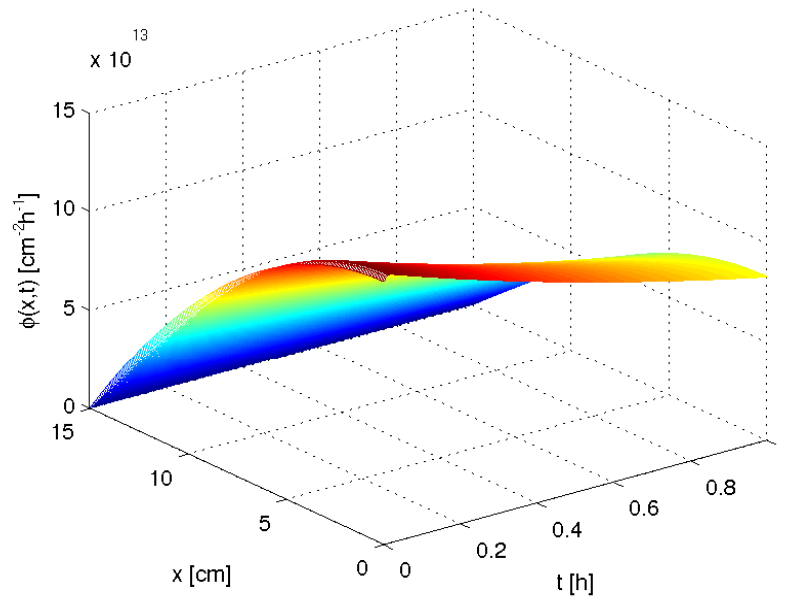


Figura 6.15: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,024$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

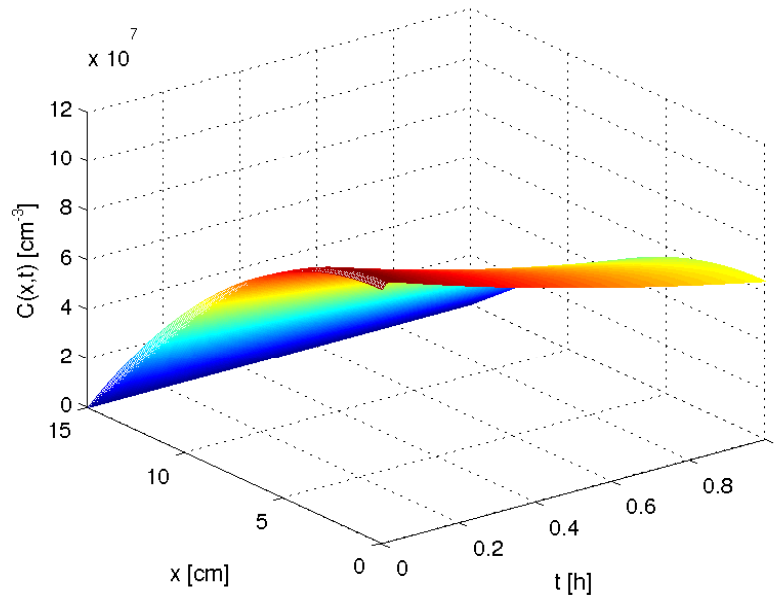


Figura 6.16: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,024$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

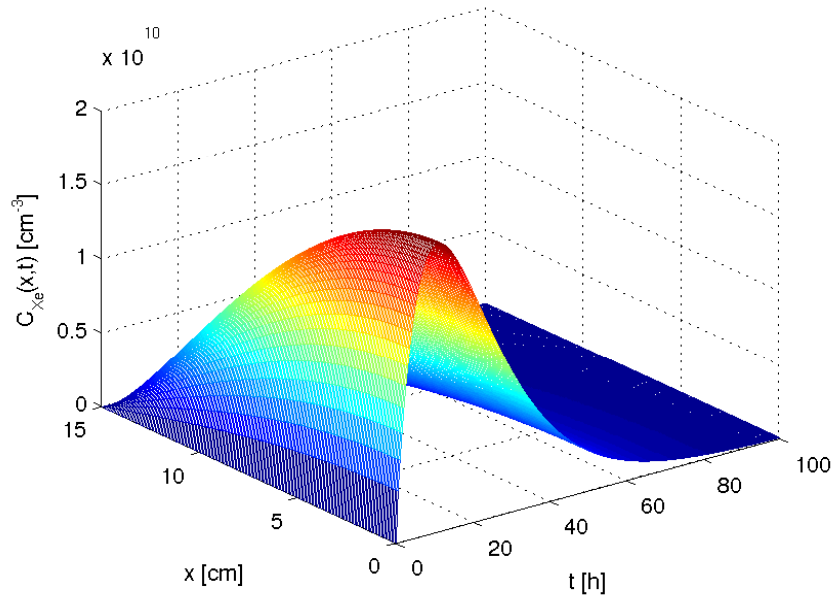


Figura 6.17: Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

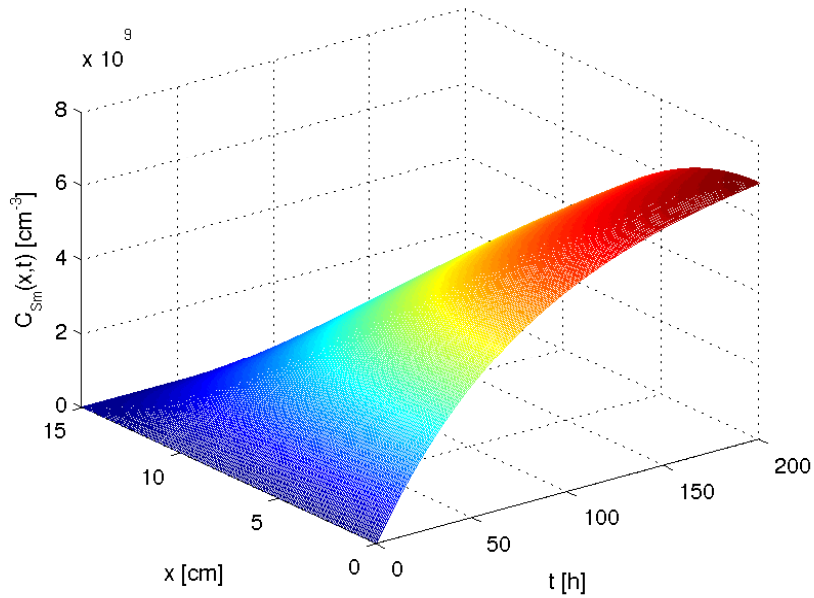


Figura 6.18: Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

A Tabela 6.1 mostra a solução com respeito ao número de termos das séries. Trunca-se em valores diferentes de $k = 10$ até $k = 150$ no ponto $x = 2cm$ e $t = 0,0015h$. Observa-se que existe uma precisão de pelo menos 7 dígitos significativos usando os 150 primeiros termos das séries.

Tabela 6.1: ϕ , C , C_{Xe} e C_{Sm} com respeito ao número de termos da série.

k	$\phi(2, 0, 001) [cm^{-2}h^{-1}]$	$C(2, 0, 001) [cm^{-3}]$	$C_{Xe}(2, 0, 001) [cm^{-3}]$	$C_{Sm}(2, 0, 001) [cm^{-3}]$
10	1,326547053538306e+14	1,03042052877142e+08	6,66004248281133e+04	0,007875547855929
50	1,326625440573669e+14	1,03048483168512e+08	6,66044717462041e+04	0,007876030771224
100	1,326625552298940e+14	1,03048520554426e+08	6,66044844520171e+04	0,007876032627156
150	1,326625552296922e+14	1,03048521612149e+08	6,66044845009508e+04	0,007876032637974

6.2 Reator com elementos reutilizados

Na escolha de distribuição dos elementos de combustível até a terceira geração é relevante a concentração dos venenos, especialmente Samário que não desaparece no reator, ao contrário de Xenônio que desaparece após algumas horas. Ao desligar o reator para manutenção, quando se recarrega o que importa é o Samário nos elementos reaproveitados que compõem o reator total, pois o mesmo não decai (é estável). Em alguns casos, dependendo da quantidade de horas, o elemento Promécio ainda permanece no reator, mesmo que a concentração seja pequena.

Foram gerados resultados de um reator que após operar 720 horas (1 mês) com fluxo inicial na ordem de 10^{14} , foi religado com fluxo inicial na ordem de 10^{14} e 10^5 . Cabe ressaltar que após um mês os únicos venenos presentes foram Samário e Promécio. Foram utilizados valores das concentrações na hora 720 como condição inicial para a simulação. Foi utilizado $\Sigma_a = 0,026$.

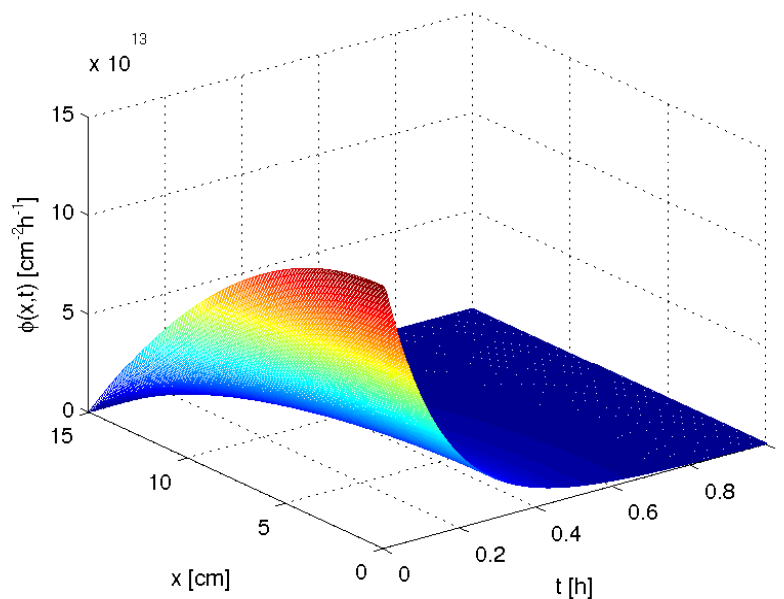


Figura 6.19: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.

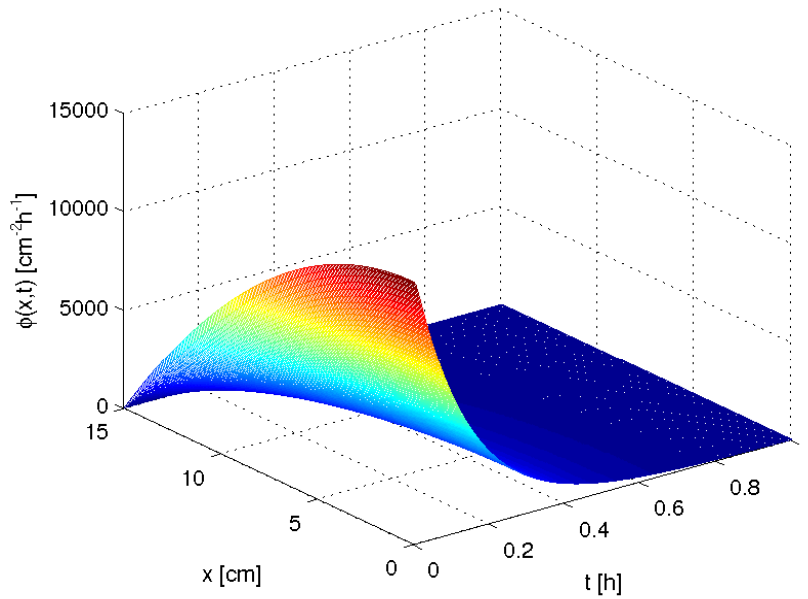


Figura 6.20: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.

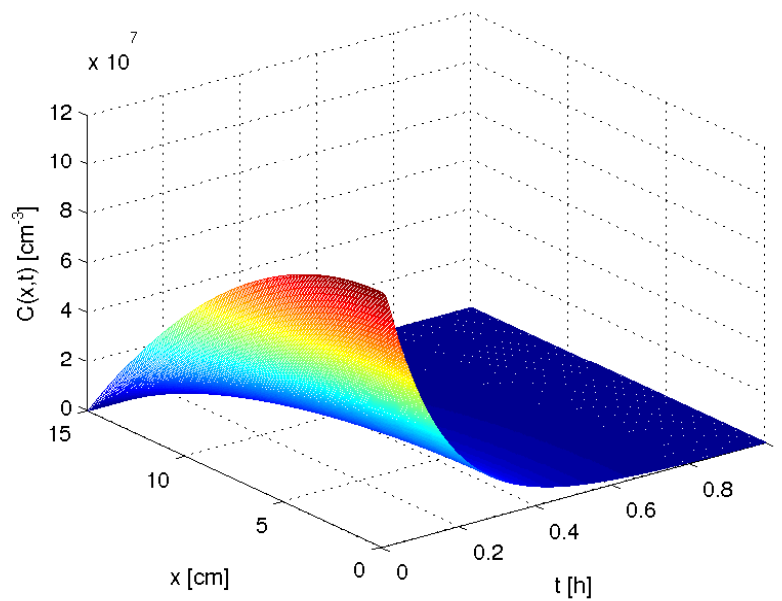


Figura 6.21: Concentração dos precursores em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.

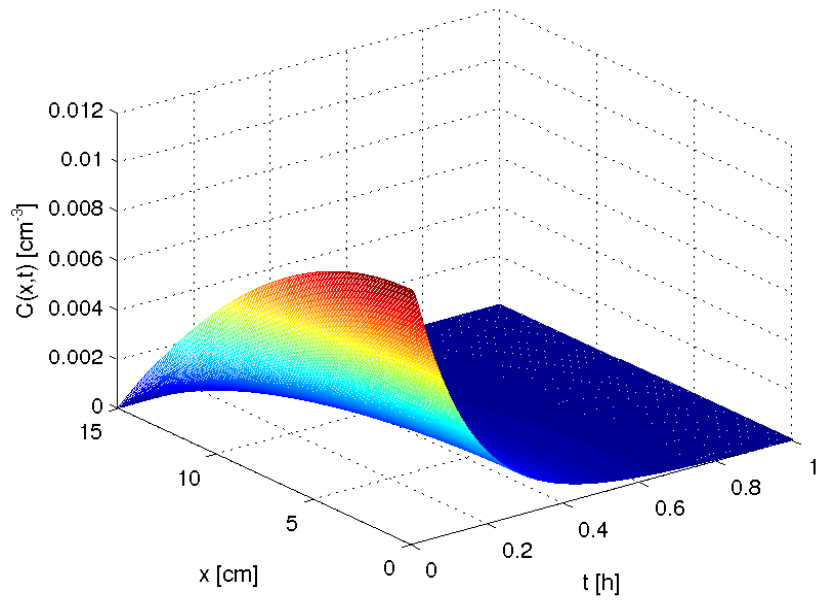


Figura 6.22: Concentração dos precursores em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.

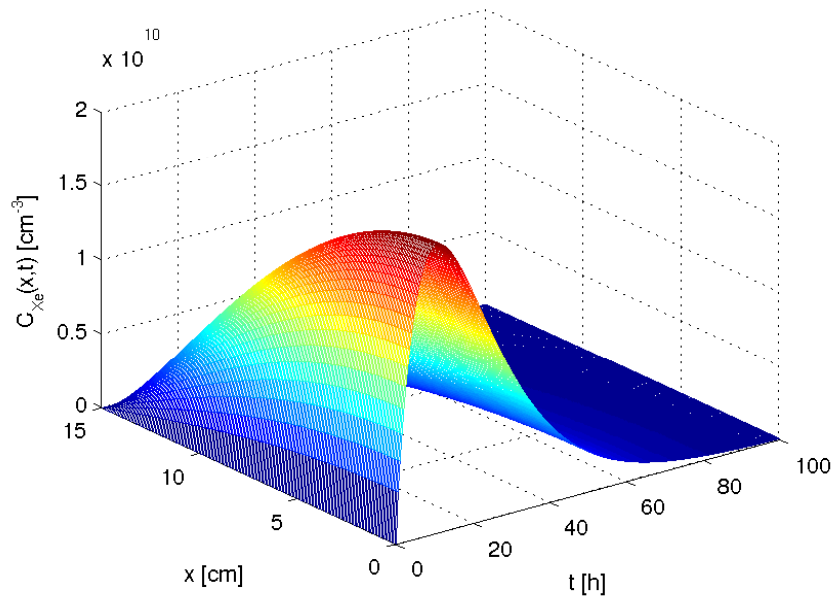


Figura 6.23: Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.

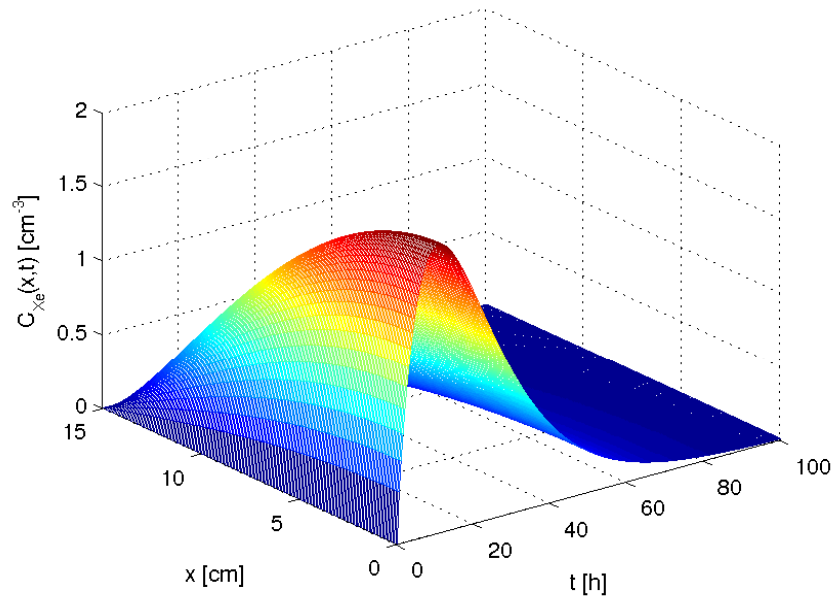


Figura 6.24: Concentração de Xenônio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.

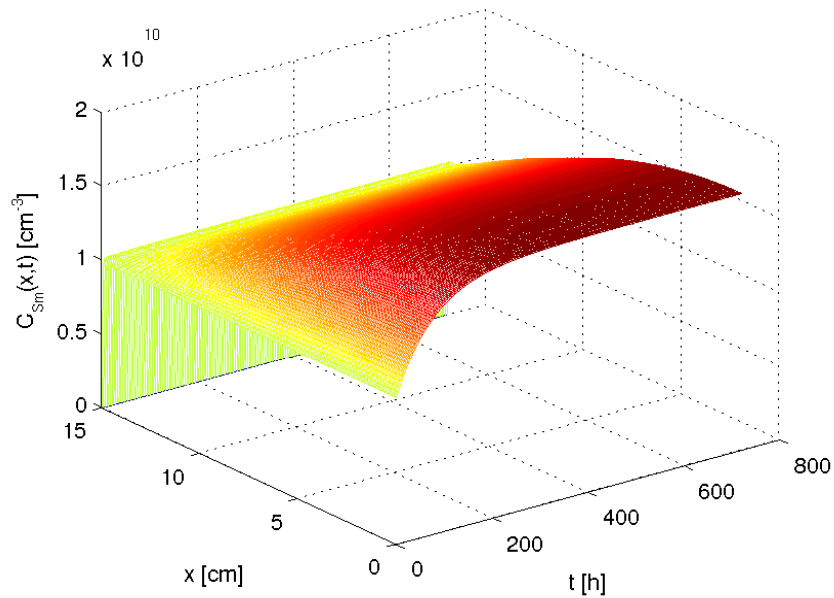


Figura 6.25: Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.

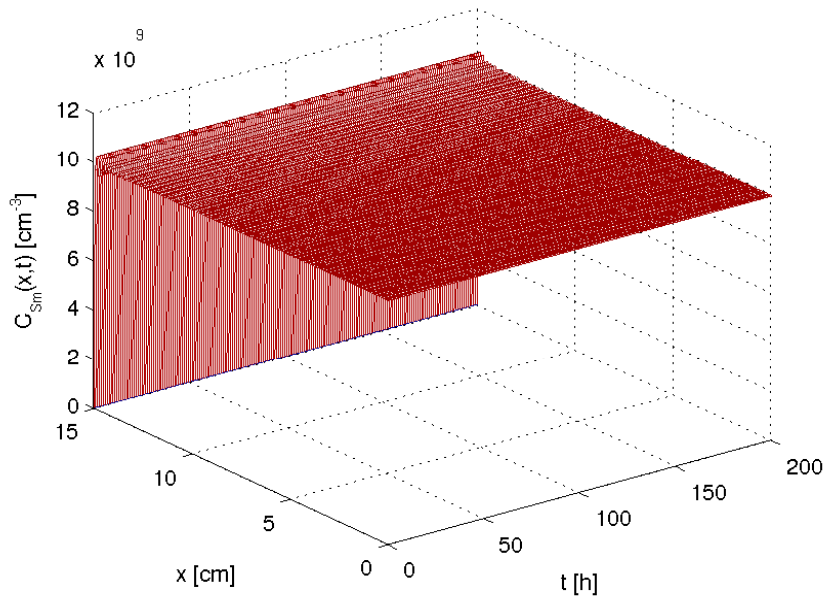


Figura 6.26: Concentração de Samário em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.

Nota-se que os resultados seguem o perfil esperado da física do problema. Quando a condição inicial é mais baixa, as quantidades são menores comparadas quando o reator é iniciado com valores mais altos. Ao aumentar os valores da seção de choque de absorção microscópica observa-se que tanto o fluxo de nêutrons quanto as concentrações de precursores e venenos decaem mais rapidamente. Para $\Sigma_a \leq 0,023$ nota-se que o reator torna-se fora de controle à medida que o tempo aumenta. Nos casos de combustível onde são utilizados elementos reprocessados observa-se que quando a condição inicial do religamento é menor, valores de C_{Sm} não alcançam valores anteriormente vistos em reatores com elementos novos. A influência da queima e a presença dos venenos manifestam-se no perfil do fluxo escalar de nêutrons e das concentrações.

É importante salientar neste trabalho que embora o caso de cinética espacial seja um modelo que considera um sistema homogenizado, pode ser considerado o primeiro passo em uma nova direção, a qual procura-se estudar o reator seccionalmente não homogêneo onde tem-se elementos de combustível até a terceira geração. Na escolha de distribuição dos elementos é relevante a concentração dos venenos, especialmente Samário que não desaparece no reator, ao contrário de Xenônio que desaparece após algumas dezenas de horas. Quando

desliga-se o reator e após um tempo suficientemente grande religa-se, Xenônio e Promécio são praticamente nulos, porém não é possível eliminar algumas substâncias como Samário, e por esse motivo utilizam-se condições iniciais diferente de zero.

6.3 Estabilidade do Algoritmo

Analisa-se a estabilidade das soluções aproximadas do problema de cinética espacial onde a não linearidade é tratada através do método de Adomian. O critério utilizado é o calculo da norma ℓ_∞ do fluxo de nêutrons, dos precursores de nêutrons atrasados e da concentração dos venenos Xenônio e Samário. Para mais informações sobre a norma do supremo (ℓ_∞), ver [Rudin, 1976]. Analisa-se também o erro das aproximações sucessivas para cada recursão de $j = 1$ até $j = 5$ com $k = 150$.

As normas ℓ_∞ medem o quanto a solução aproximada está variando com relação a solução anterior e quanto o erro das aproximações sucessivas está se aproximando de zero. Observa-se através das Tabelas 6.2 e 6.3 que a norma do supremo está indo para zero, isto é

$$\begin{aligned} \|\mathbf{u}^j\|_\infty &\rightarrow 0, \\ \|\mathbf{u}^j - \mathbf{u}^{j-1}\|_\infty &\rightarrow 0. \end{aligned} \tag{6.1}$$

Tabela 6.2: Normas ℓ_∞ de $\phi_k^j(x, t)$, $C_k^j(x, t)$, $(C_{Xe})_k^j(x, t)$ e $(C_{Sm})_k^j(x, t)$ como teste de estabilidade do método.

	$\ \phi_k^j(x, t)\ _\infty$	$\ C_k^j(x, t)\ _\infty$	$\ (C_{Xe})_k^j(x, t)\ _\infty$	$\ (C_{Sm})_k^j(x, t)\ _\infty$
j=1	23935429,4437044	632,358191397006	1917101,25764575	4,296669715363316
j=2	63,7099732952776	8,32005800913075e-07	4,28850329251362	8,58883787455594e-06
j=3	0,000500681390886099	4,51215841844555e-12	2,32049214920334e-05	3,76330899326619e-11
j=4	4,79193555338737e-09	3,43033391072065e-17	1,76141397131278e-10	4,41012621786633e-15
j=5	4,80836748098678e-14	2,79028727969430e-22	1,43090172340101e-15	2,39911383353030e-16

Tabela 6.3: Norma ℓ_∞ da diferença das aproximações sucessivas de $\phi_k^j(x, t)$, $C_k^j(x, t)$, $(C_{Xe})_k^j(x, t)$ e $(C_{Sm})_k^j(x, t)$ como teste de estabilidade do método.

	$\ \phi_k^j - \phi_k^{j-1}\ _\infty$	$\ C_k^j - C_k^{j-1}\ _\infty$	$\ (C_{Xe})_k^j - (C_{Xe})_k^{j-1}\ _\infty$	$\ (C_{Sm})_k^j - (C_{Sm})_k^{j-1}\ _\infty$
j=2	23935493,1536777	632,358192229012	1917105,54614904	4,29670574247104
j=3	63,7104739766685	8,32010313071494e-07	4,28852649743512	8,58887550764588e-06
j=4	0,000500686182821653	4,51219272178466e-12	2,32050976334305e-05	3,76333298440453e-11
j=5	4,79198363226297e-09	3,43036181353986e-17	1,76142828030278e-10	4,17021483451330e-15

7 CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS

No presente trabalho, desenvolveu-se um novo modelo de cinética incluindo efeitos de queima (considerando venenos produtos de fissão), com duas escalas de tempo, na qual além das habituais variações de curto prazo na reatividade ($10^1 s$), que representam efeitos da operação do reator, também são considerados efeitos de longo prazo através dos venenos de nêutrons ($\sim 10^4 s$). Cabe salientar que o tradicional modelo de cinética pontual é linear, enquanto que a inclusão dos venenos de nêutrons dependem da população de nêutrons e portanto, tornam o modelo não-linear. Uma solução em representação analítica foi desenvolvida com reatividade controlada externamente e internamente pela queima para o modelo de cinética pontual, e após foi resolvido o modelo das equações de cinética espacial homogenizado para o caso monoenergético e unidimensional em geometria cartesiana, ambos utilizando o método da decomposição de Adomian [Adomian, 1988], [Adomian, 1994]. Obtiveram-se resultados para a densidade de nêutrons, concentração de nêutrons atrasados para um grupo de precursores, concentração de Xenônio e para a concentração do Samário.

A solução obtida permite calcular o comportamento transiente da cinética de um reator nuclear onde somente elementos novos foram utilizados assim como a composição do combustível com elementos reutilizados. Foram analisados casos em que a reatividade era constante e casos onde a reatividade possuía dependência temporal. Para todos os casos, os resultados encontrados estão de acordo com a expectativa física.

No caso oscilatório, um comportamento inesperado ocorre em tempos pequenos onde a concentração de Samário excede a concentração de Xenônio, que é considerado contrário intuitivamente se levarmos em consideração as meias-vidas envolvidas. Além disso, este resultado mostra claramente que há uma influência de pequenas escalas de tempo em grandes escalas de tempo e vice-versa.

Embora as equações tenham caráter rígido, o método proposto conseguiu superar esse problema sem a necessidade da divisão do modelo em pequenos intervalos de tempo. A princípio, não há instabilidades decorrentes da implementação computacional. A precisão dos resultados aqui mostrados pode ser obtida truncando-se o método recursivo para o caso de cinética sem dependência espacial após nove recursões. Para o caso espacial a precisão

dos resultados pode ser obtida truncando-se o método após cinco recursões. O erro pode ser controlado, uma vez que pode-se obter precisão desejada, utilizando-se um número adequado de equações no sistema recursivo.

O estudo das equações de cinética acopladas aos venenos produtos de fissão dão um passo em uma nova direção, uma vez que, em nosso conhecimento, este tipo de solução não existe na literatura. Tal estudo permite uma análise física realística do reator nuclear, uma vez que analisa-se seu comportamento em ciclos e considerando outros elementos junto ao combustível, como é realizado na presente discussão.

Possíveis desdobramentos deste trabalho na área de engenharia de reatores seriam: a inclusão de mais grupos de precursores de nêutrons atrasados, a sofisticação para um modelo de cinética em diferentes sistemas de coordenadas, a modelagem da reatividade como dependente da temperatura [Silva, 2011]. Alguns aspectos computacionais que podem ser desenvolvidos são a otimização do algoritmo, um estudo do tempo computacional em função do número de termos, e análise do erro genuíno na solução obtida. O autor pretende fazer trabalhos futuros e analisar um sistema mais completo buscando a solução analítica, pois as não linearidades se comportarão da mesma forma.

Resultados são consistentes com a física do problema em consideração. Graus espaciais de liberdade foram considerados, fazendo com que o presente trabalho possa servir como referência para a construção hierárquica do modelo. De acordo com a idade do elemento que está sendo utilizado, implica uma alteração das concentrações, especialmente dos venenos, o que nos remete futuramente a possibilidade de tratar de uma distribuição em subdomínios. Ao resolver o caso espacial para o problema homogenizado, nota-se que em cada subdomínio a solução tem estrutura semelhante, o que varia são as condições de contorno, pois os contornos dividem regiões com parâmetros nucleares diferentes. As condições iniciais são um pouco diferentes, pois elementos novos não possuem venenos enquanto elementos reutilizados possuem pelo menos acúmulo de Samário.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Adams, C. H., Aboanber, A. E., e Hamada, Y. M. An efficient code system for solving space-independent nuclear reactor dynamics, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 29, pp. 2159–2172, 2002.

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

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

Agency, I. A. E., 2002, Heavy Water Reactors: Status and Projected Development, Technical Reports Series No. 407. Technical report, Vienna.

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

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

Burden, R. L. e Faires, J. D. **Numerical Analysis 8E**. Cengage Learning, USA, 2008.

Burguer, B., **Electricity production from solar and wind in Germany in 2014**, <http://www.ise.fraunhofer.de/en/news/news-2013>, 2014. Acessado em: 05/04/2015.

Buzano, M. L.; Corno, S. E. C. I. A new procedure for integrating the point kinetic equations for fission reactors, **Applied Mathematics and Computation**, vol. 29, pp. 5–19, 1995.

Cacuci, D. G. **Handbook of nuclear engineering**. Springer, Germany, 2010.

DOE, F. H. **Nuclear Physics and Reactor Theory**. U.S. Department of Energy Washington, USA, 1993.

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

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

Nichols, A. L., Aldama, D. L., e VerPELLI, M., **Handbook of nuclear data for safeguards: database extensions, august 2008**, <https://www-nds.iaea.org/sgnucdat/safeg2008.pdf>, 2008. Acessado em: 11/10/2014.

Özisik, M. **Heat Conduction**. John Wiley & Sons, New York, 2nd edition, 1974.

Petersen, C. Z., 2011. **Solução analítica das equações da cinética pontual e espacial da teoria de difusão de nêutrons pelas técnicas da GITT e decomposição**, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica – PROMEC, Porto Alegre, Brazil.

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

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

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

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

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

Silva, J., 2011. **Cinética pontual com realimentação de temperatura considerando um grupo de precursores de nêutrons atrasados**, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica – PROMEC, Porto Alegre, Brasil.

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

Weymar, G. J., 2016. **Uma Solução da equação multidimensional de advecção-difusão para a simulação da dispersão de contaminantes reativos na camada limite atmosférica**, Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul – UFRGS, Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica – PROMEC, Porto Alegre, Brazil.

Zhangsheng, C., Xuewen, G., e Lei, Y. A uniform formula of neutron multiplication calculation from sub-criticality to prompt-criticality with step change of reactivity, **Nuclear Power Engineering**, vol. 27(2), pp. 14–16, 2006.

APÊNDICE A – O MÉTODO DA DECOMPOSIÇÃO DE ADOMIAN

O método da Decomposição de Adomian é de grande interesse, pois tem sido aplicado em diferentes tipos de problemas para obter soluções. O método pode ser aplicado, por exemplo, a problemas de valor de contorno, a equações algébricas e equações diferenciais parciais [Biazar, 2007], [Weymar, 2016]. Tem-se interesse nesse método, pois fornece a solução numa série que converge rapidamente e com componentes que são facilmente calculadas.

A grande vantagem do método é que ele pode ser aplicado em todos tipos de equações diferenciais e integrais, lineares ou não-lineares, homogêneas ou não-homogêneas e com coeficientes constantes ou variáveis [Adomian, 1988], [Adomian, 1994]. Outra grande utilidade do método é sua capacidade de reduzir significativamente a dificuldade dos cálculos, mantendo a alta precisão da solução numérica.

A seguir, apresenta-se uma aplicação do método da Decomposição de Adomian num sistema de equações diferenciais:

Considerando o sistema de equações diferenciais ordinárias:

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

que pode ser escrito na forma compacta:

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

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

Assumindo que para qualquer g_k o sistema (A.2) possua somente uma solução, aplica-se o método da Decomposição de Adomian [Adomian, 1988], Adomian [1994] no sis-

tema (A.2), tem-se

$$Ly_k = N_k(y_1, y_2, \dots, y_m) + g_k \quad (\text{A.3})$$

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

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

para $k = 1 : m$, na qual $y_k(0)$ é a condição inicial da equação (A.1). O método clássico da decomposição de Adomian consiste em aproximar a solução (A.4) por uma série infinita da forma:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

APÊNDICE B – TABELAS CINÉTICA PONTUAL

As tabelas encontradas neste apêndice mostram resultados obtidos através da metodologia aplicada neste trabalho para a densidade de nêutrons, a concentração de precursores de nêutrons atrasados, a concentração de Xenônio e a concentração de Samário, utilizando como condições iniciais um reator com elementos novos onde todos os venenos iniciam nulos e $n(0) = 1 [cm^{-3}]$ e $C(0) = 100 [cm^{-3}]$.

Tabela B.1: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para a reatividade negativa.

$\rho_c(t) = -0,0001$				
t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
0,2	0,110121458637980	92,6106667498664	30,7795064954396	0,120941079035645
0,4	0,101095890552017	85,0202852970936	69,4630593152759	0,469962392348853
0,6	0,0928100591181549	78,0520124271243	115,021384632658	1,02774991496572
0,8	0,0852033354295499	71,6548600437380	166,516348645498	1,77657422046530
2	0,0510065416123010	42,8958160642678	557,725329029988	9,45750854606987
4	0,0216890908415570	18,2402339760830	1298,62466544881	29,7528923611086
6	0,00922267314697092	7,75614421195031	1935,38638086808	54,2373973022641
10	2,31827584459621e-05	0,0194963884301386	2513,88223723836	229,196100921494
20	4,48043124447212e-09	3,76798247194585e-06	910,582908801185	432,763502647843
100	0	0	13,3111136335254	803,345931215346
200	0	0	0,00690670009921	1030,62324881792

Tabela B.2: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = 0.0005t$.

$\rho_c(t) = 0,0005t$				
t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
1	0,120168557190652	100,879861485267	265,459846890705	3,10354204987601
4	0,120259199687256	100,880221676371	2303,64966052431	49,0138775126169
10	0,120442827151797	100,882565602638	9126,50050838382	298,558781728592
50	0,121077786409552	100,906091382246	28667,7374235308	2472,33010819770
100	0,121748594782873	101,182305387468	38192,9497006468	21100,1960098543
500	0,148885933014236	109,391670289030	41113,2876843746	206462,170095238
1000	0,229154875434498	144,317770960937	53719,0775148374	488489,336969696

Tabela B.3: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = -0.0005t$.

$\rho_c(t) = -0,0005t$				
t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
1	0,120108487929601	100,879861485267	265,459846890705	3,10354204987578
4	0,120018065008671	100,879501702450	2303,64514598579	49,0138038366559
10	0,119835700233889	100,877165785486	9126,37678661714	298,555796449399
50	0,119187464806247	100,581794669236	1156162,07449290	640418,227245666
100	0,116869275834303	99,7307054623067	37832,9462449277	61458,3840081523
500	0,0997145120824436	94,1961875897723	35851,8072804081	198604,645431134
1000	0,0744479211185593	78,1443180091924	29880,6206786531	409101,272073598

Tabela B.4: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

$\rho_c = -0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$				
t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
0,2	0,120138389917778	100,879861484084	32,0846302892377	0,124605165321553
0,4	0,120138265401013	100,879861232796	75,0676028181918	0,497909565289818
0,6	0,120138143323422	100,879860734544	128,550400843118	1,11926474104821
0,8	0,120138025018227	100,879859991260	192,141421402729	1,98802392471517
2	0,120137462426814	100,879851075195	765,356327443820	12,3600560540569
4	0,120137434619574	100,879828170755	2303,64719197381	49,0138371150763
6	0,120138459434470	100,879815655711	4338,00471843137	109,335285554642
10	0,120139537799651	100,879825490714	20709,2586806860	1144,97723070708
20	0,120139505936997	100,879825667614	33266,3804818275	4221,42391087106
100	0,120137410059263	100,879818009819	38120,1023927792	21087,9031255954
200	0,120139472398279	100,879802662097	38182,8067364782	61613,2595977669

Tabela B.5: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

$\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$				
t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
0,2	0,120138641075666	100,879861484084	32,0846302892377	0,124605165321553
0,4	0,120138765562550	100,879861734514	75,0676029810839	0,497909565931531
0,6	0,120138887606234	100,879862234202	128,550401544727	1,11926474484486
0,8	0,120139005865294	100,879862974145	192,141423279882	1,98802393725758
2	0,120139568079400	100,879871893336	765,356369127534	12,3600565488657
4	0,120139594807401	100,879894781950	2303,64761247224	49,0138442027937
6	0,120138568504988	100,879907241817	4338,00616392493	109,335315373484
10	0,120137486682427	100,879896258676	20709,2681745007	1144,97773775697
20	0,120137509355170	100,879892278802	33266,3951690381	4221,42581591682
100	0,120139570246417	100,879884620999	38120,1192485553	21087,9126905278
200	0,120137475817101	100,879873430029	38182,8240913168	61613,2875613126

Tabela B.6: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para a reatividade definida por partes com $\rho_1 = 0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = -0,0001$.

t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
0,2	0,120139728788781	100,879871472189	32,0846335320616	0,124605178096657
0,4	0,120139731631581	100,879873871696	75,0676111962038	0,497909618853125
0,6	0,120138533074781	100,879876272350	128,550416610207	1,11926487020018
0,8	0,120138533050866	100,879876270677	192,141446374970	1,98802416856310
2	0,120137322907662	100,879869072516	765,356446982352	12,3600579161650
4	0,120137328083809	100,879873864348	2303,64768258964	49,0138466285447
6	0,120138531580849	100,879876236756	4338,00595551510	109,335313498147
10	0,120139728382563	100,879875663060	20709,2658192032	1144,97761731007
20	0,120138525249002	100,879871361922	33266,3916546976	4221,42535116298
100	0,120137303525810	100,879863705320	38120,1152029941	21087,9103356841
200	0,120138491714881	100,879852838018	38182,8197992051	61613,2806644395

Tabela B.7: $n(t)$, $C(t)$, $C_{Xe}(t)$ e $C_{Sm}(t)$ para a reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$.

t [h]	$n(t)[cm^{-3}]$	$C(t)[cm^{-3}]$	$C_{Xe}(t)[cm^{-3}]$	$C_{Sm}(t)[cm^{-3}]$
0,2	0,120137302228666	100,879851495979	32,0846270464138	0,124605152546336
0,4	0,120137299355322	100,879849095662	75,0675946030875	0,497909512368349
0,6	0,120138497852688	100,879846696490	128,550385777689	1,11926461569287
0,8	0,120138497828773	100,879846694818	192,141398307735	1,98802369341021
2	0,120139707604300	100,879853896130	765,356249589503	12,3600546867654
4	0,120139701348139	100,879849088313	2303,64712185821	49,0138346893644
6	0,120138496358757	100,879846660897	4338,00492684420	109,335287430055
10	0,120137296106434	100,879846087202	20709,2610360478	1144,97735115658
20	0,120138490026914	100,879846585889	33266,3839964479	4221,42437564606
100	0,120139676789411	100,879838929290	38120,1064394972	21087,9054807338
200	0,120138456492812	100,879823262172	38182,8110312579	61613,2664965200

APÊNDICE C – REATIVIDADE OSCILATÓRIA

As Figuras abaixo mostram resultados obtidos através da metodologia aplicada neste trabalho para a densidade de nêutrons, a concentração de precursores de nêutrons atrasados, a concentração de Xenônio e a concentração de Samário, para um reator somente com elementos novos e para um reator operando com elementos reutilizados, com reatividade do tipo oscilatória (senoidal e definida por partes).

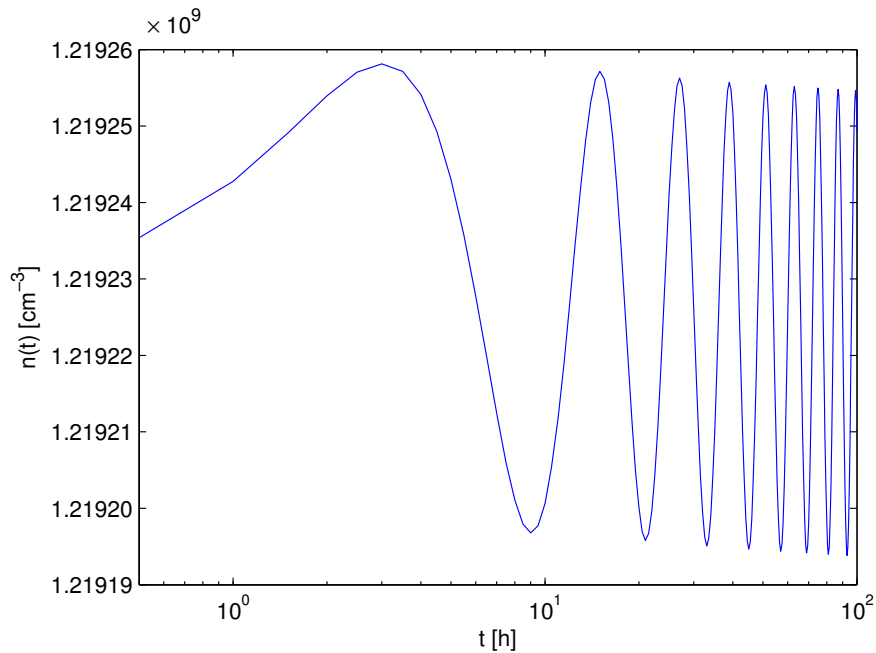


Figura C.1: Densidade de nêutrons em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

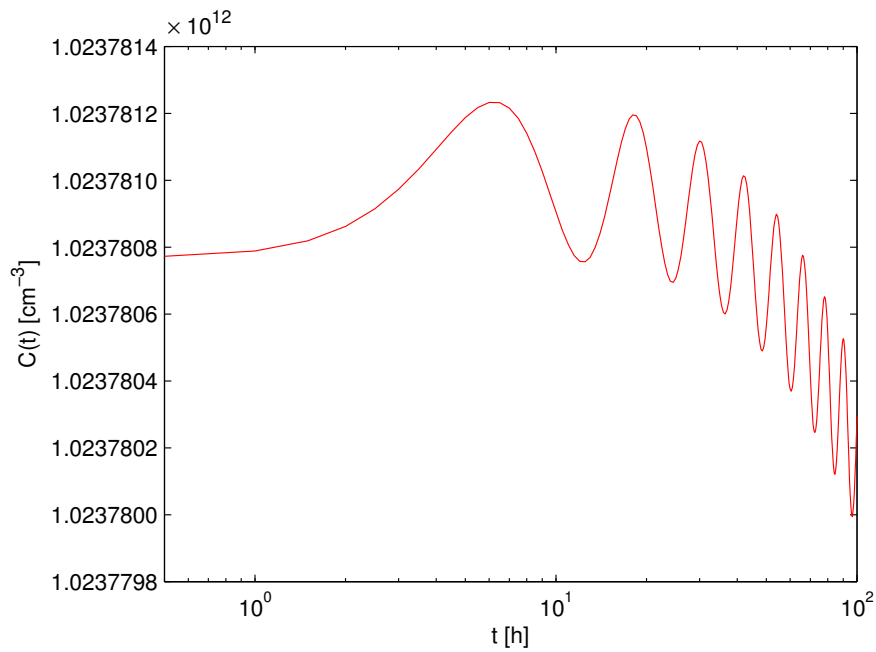


Figura C.2: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t em horas e com $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

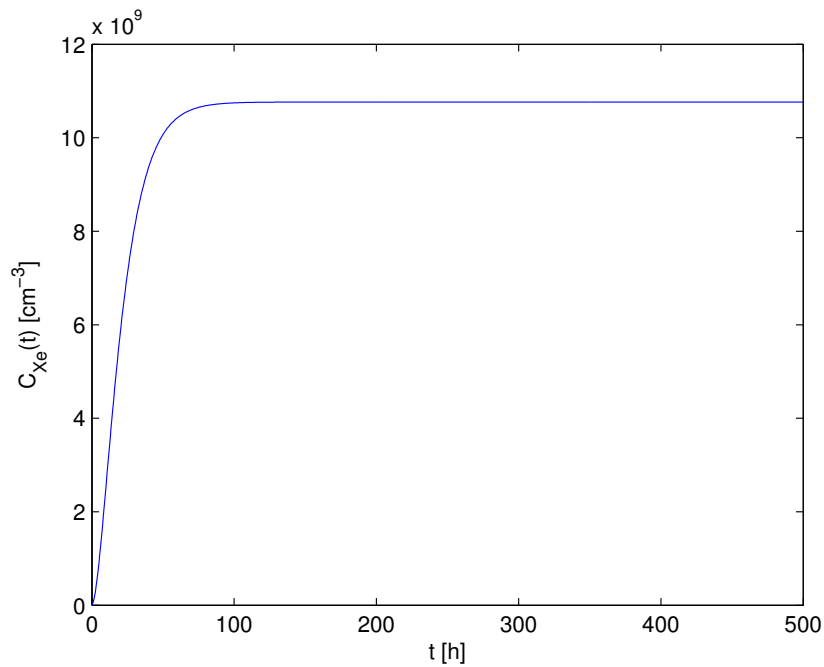


Figura C.3: Concentração de Xenônio em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

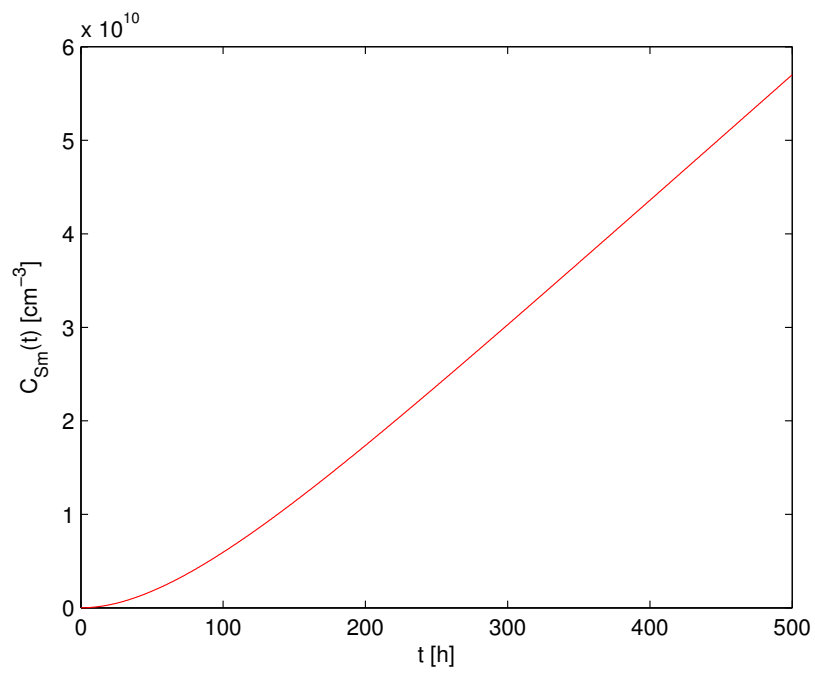


Figura C.4: Concentração de Samário em função do tempo t em horas com $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$.

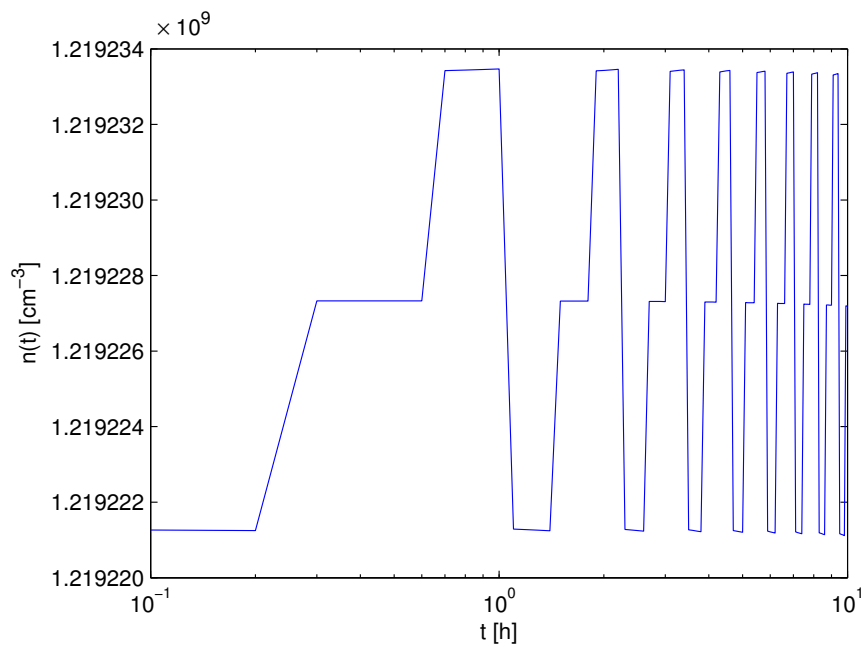


Figura C.5: $n(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$.

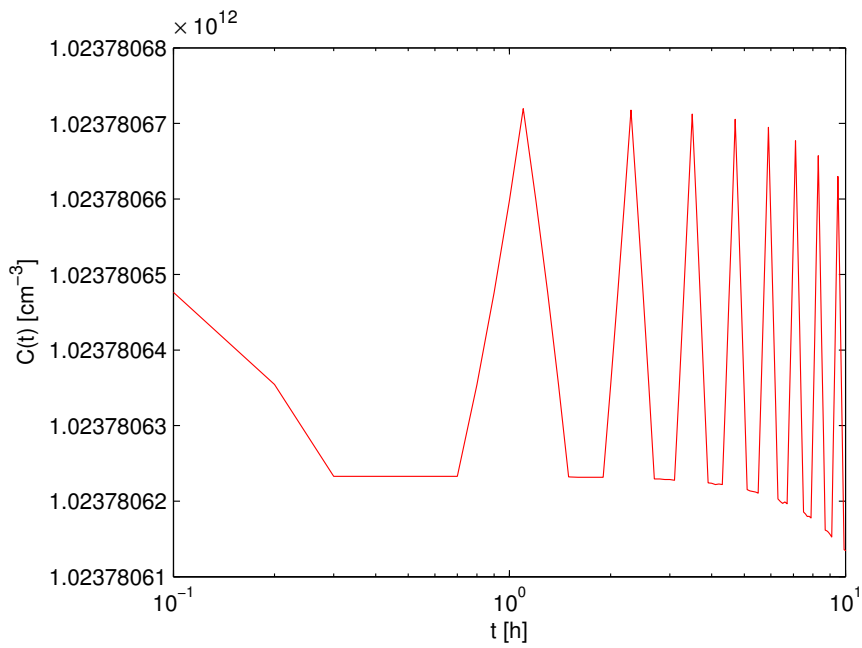


Figura C.6: $C(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$.

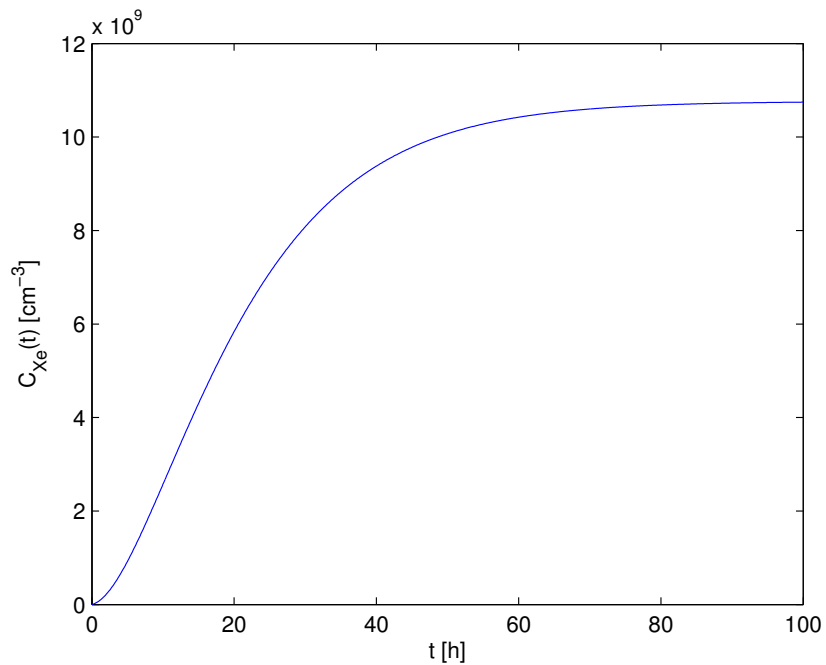


Figura C.7: $C_{Xe}(t)$ em função do tempo t em horas e com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$.

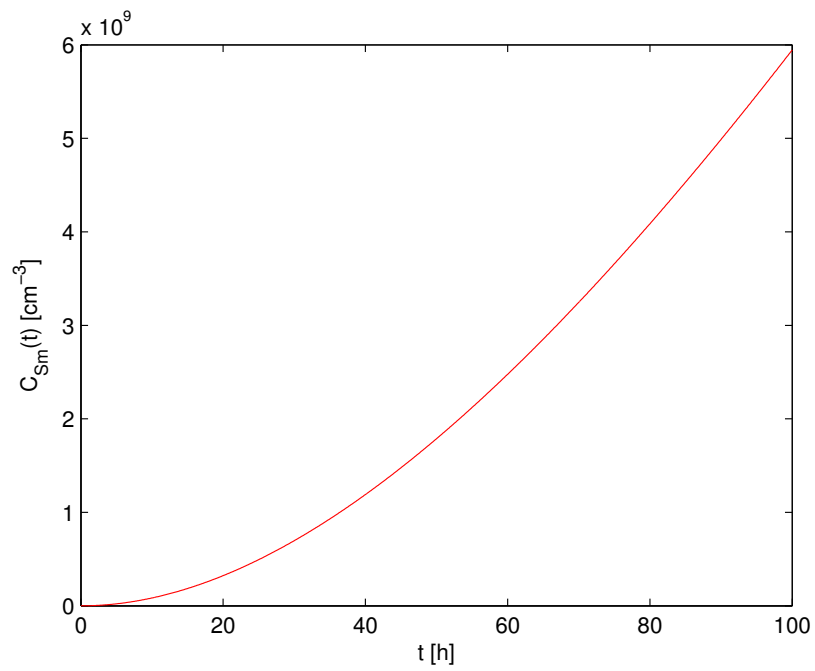


Figura C.8: $C_{Sm}(t)$ em função do tempo t em horas com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$.

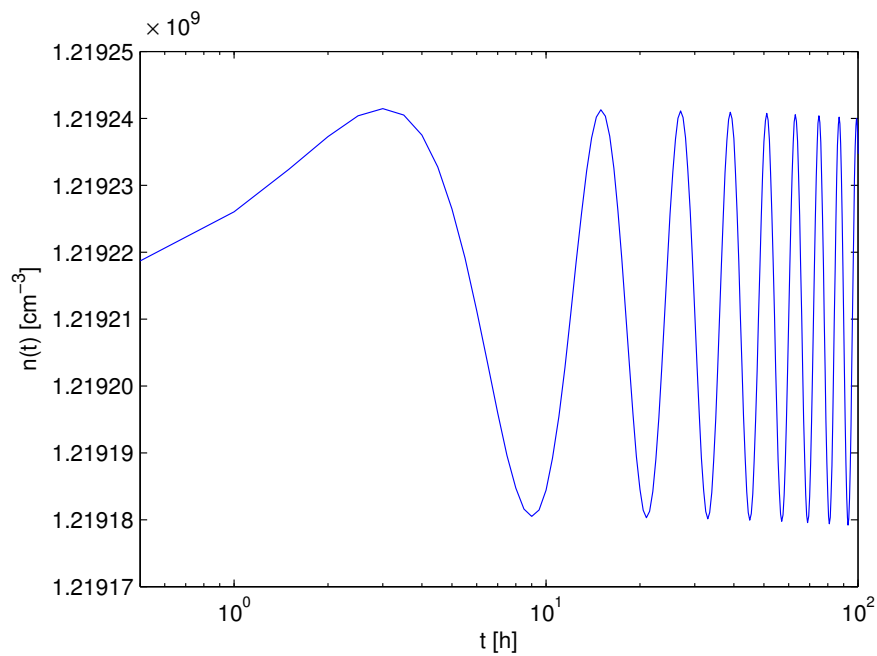


Figura C.9: Densidade de nêutrons em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$ em um reator com elementos reutilizados.

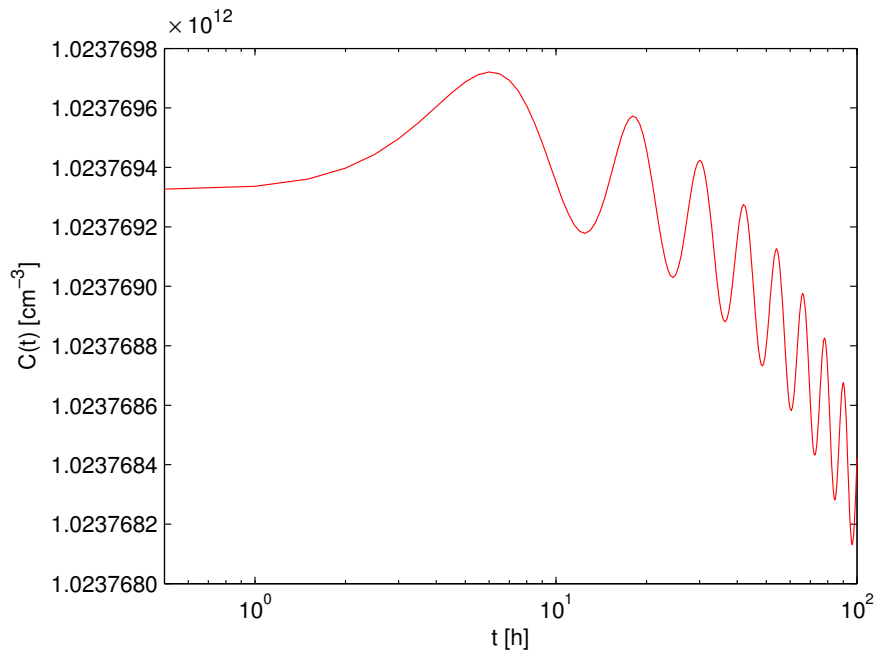


Figura C.10: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$ em um reator com elementos reutilizados.

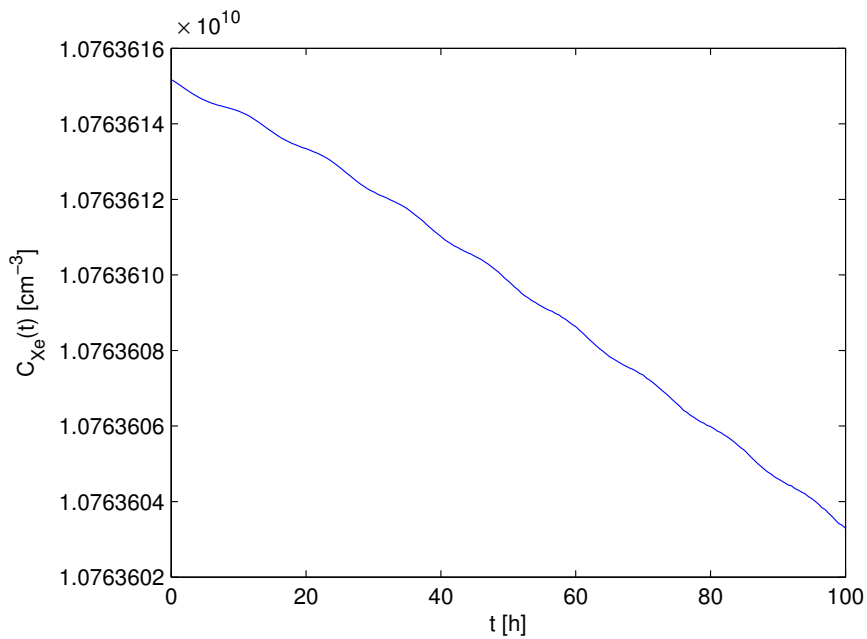


Figura C.11: Concentração de Xenônio em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin\left(\frac{\pi t}{6}\right)$ em um reator com elementos reutilizados.

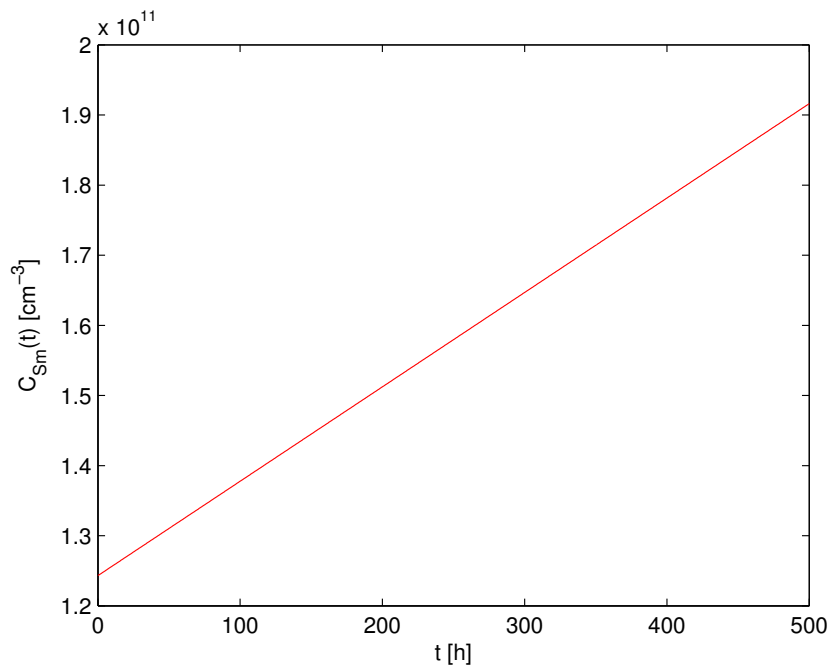


Figura C.12: Concentração de Samário em função do tempo t com $\rho_c = 0,0001 \sin(\frac{\pi t}{6})$ em um reator com elementos reutilizados.

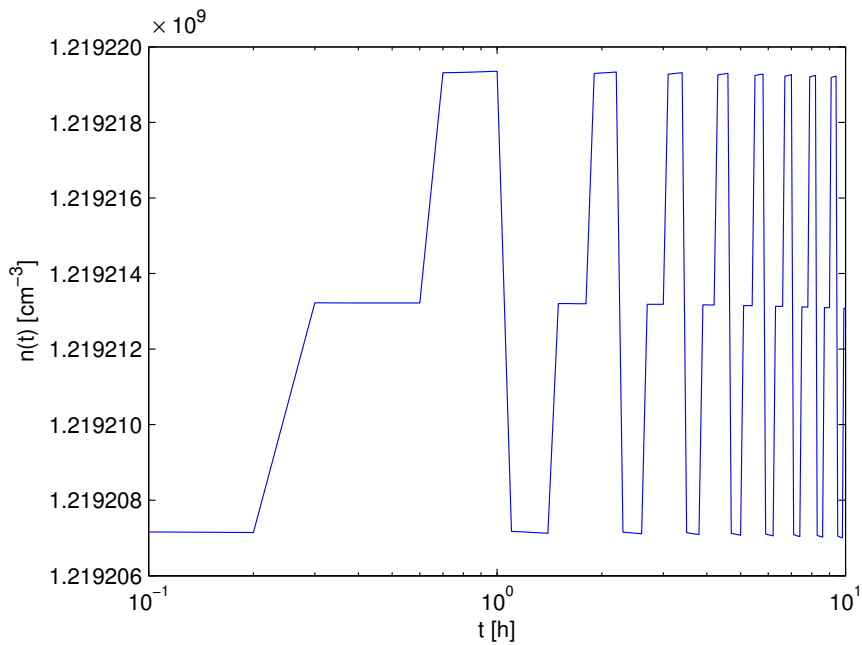


Figura C.13: $n(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

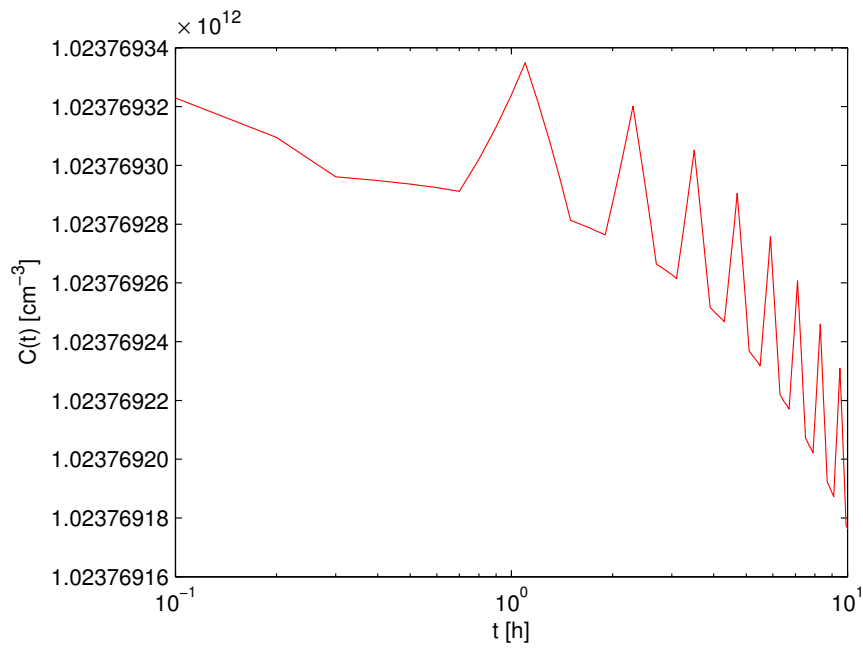


Figura C.14: $C(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

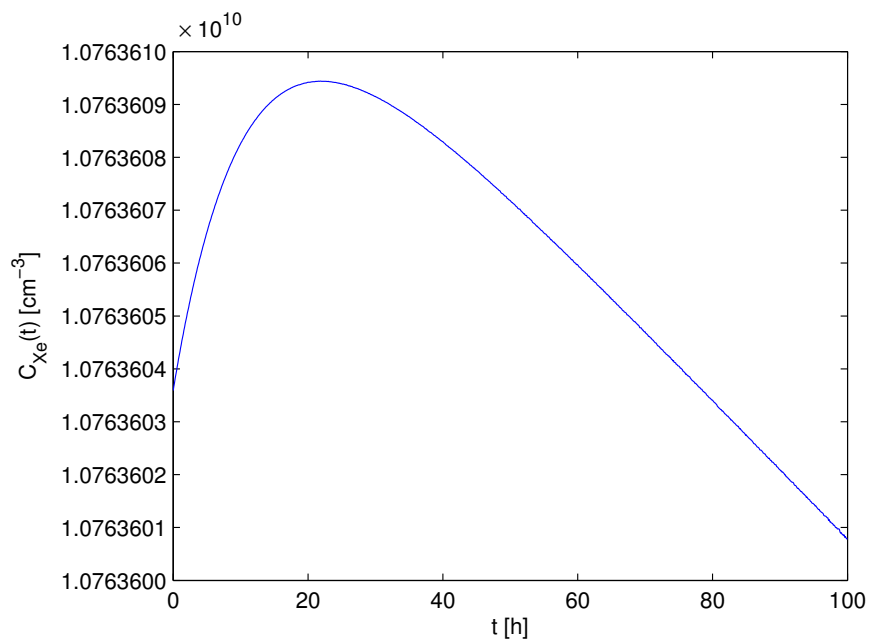


Figura C.15: $C_{Xe}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

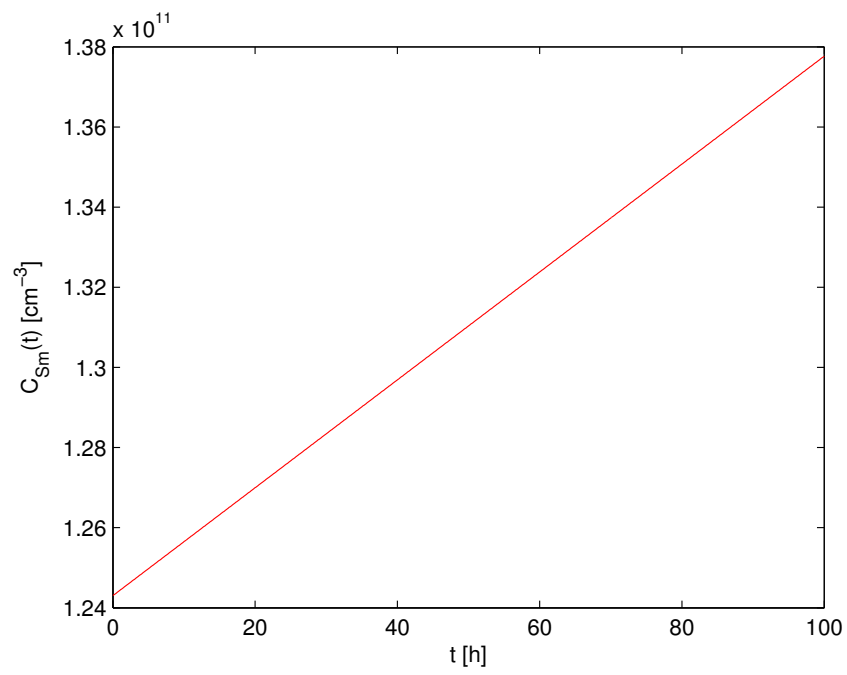


Figura C.16: $C_{Sm}(t)$ em função do tempo t com reatividade definida por partes com $\rho_1 = -0,0001$, $\rho_2 = 0$ e $\rho_3 = 0,0001$ em um reator com elementos reutilizados.

APÊNDICE D – RESULTADOS CINÉTICA ESPACIAL

As Figuras abaixo mostram resultados para o caso espacial obtidos através da metodologia aplicada neste trabalho para o fluxo escalar de nêutrons, a concentração de precursores de nêutrons atrasados, a concentração de Iodo e a concentração de Promécio para um reator com elementos de combustíveis novos e com elementos reutilizados.

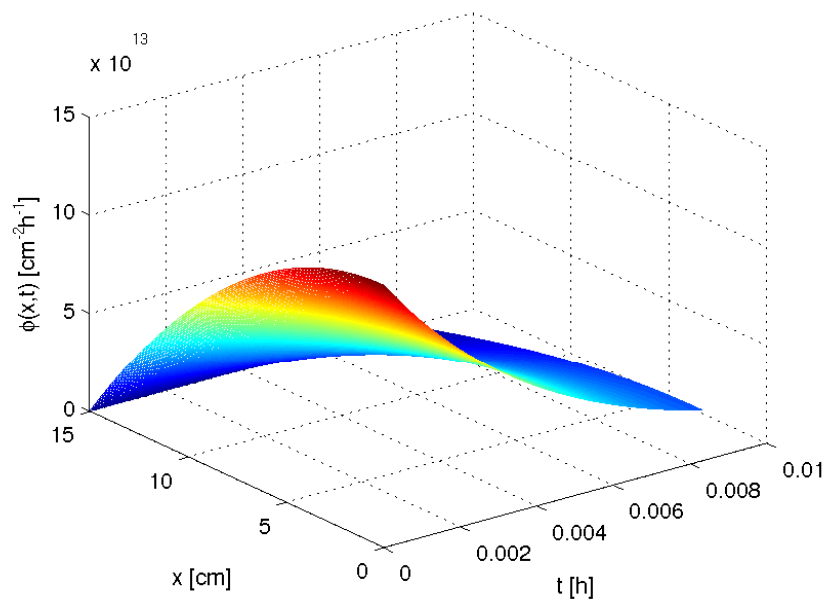


Figura D.1: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

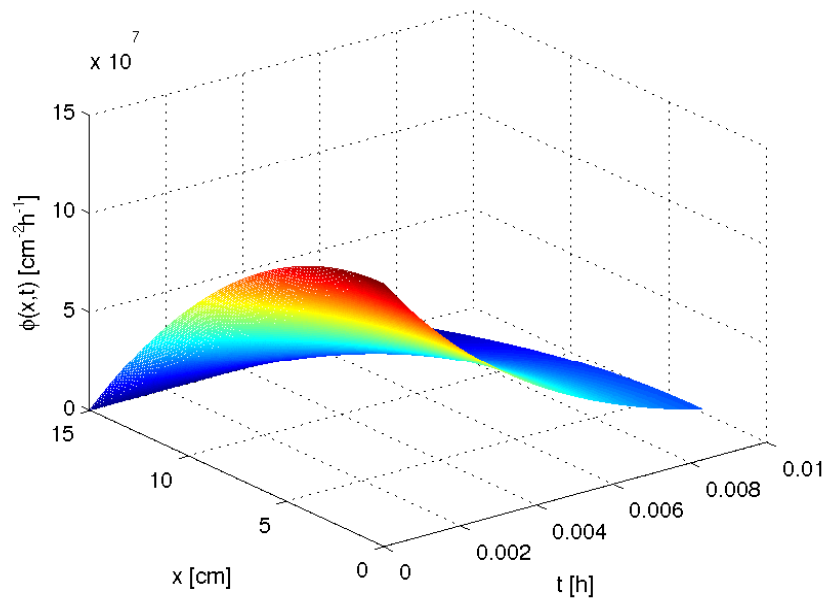


Figura D.2: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

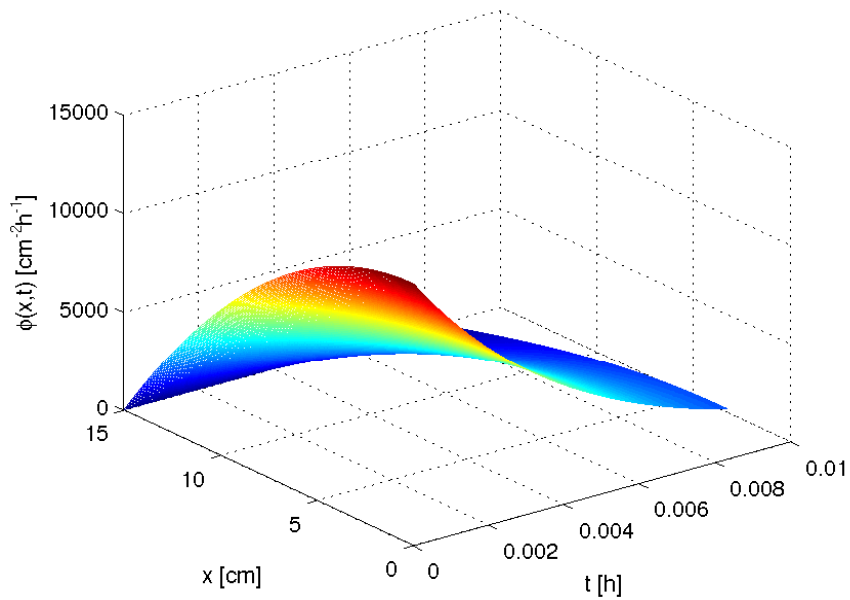


Figura D.3: Fluxo de nêutrons em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

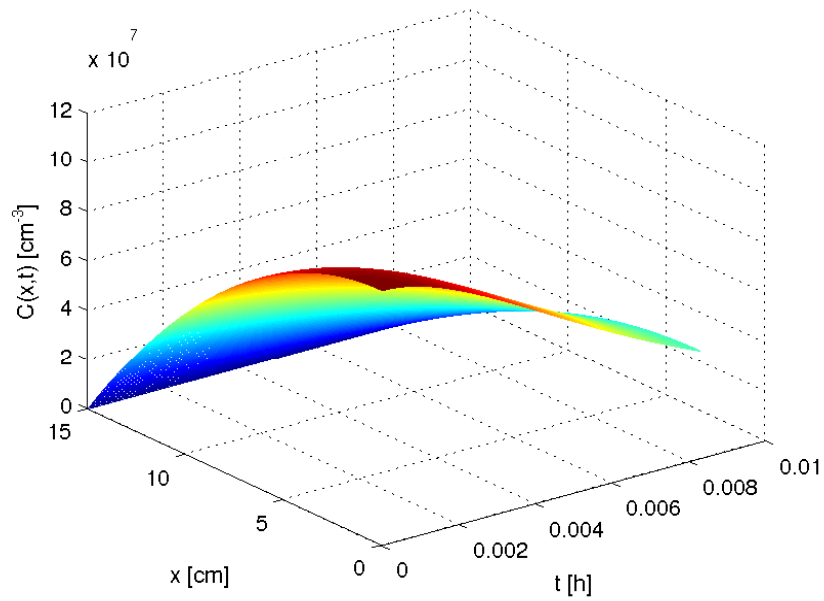


Figura D.4: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

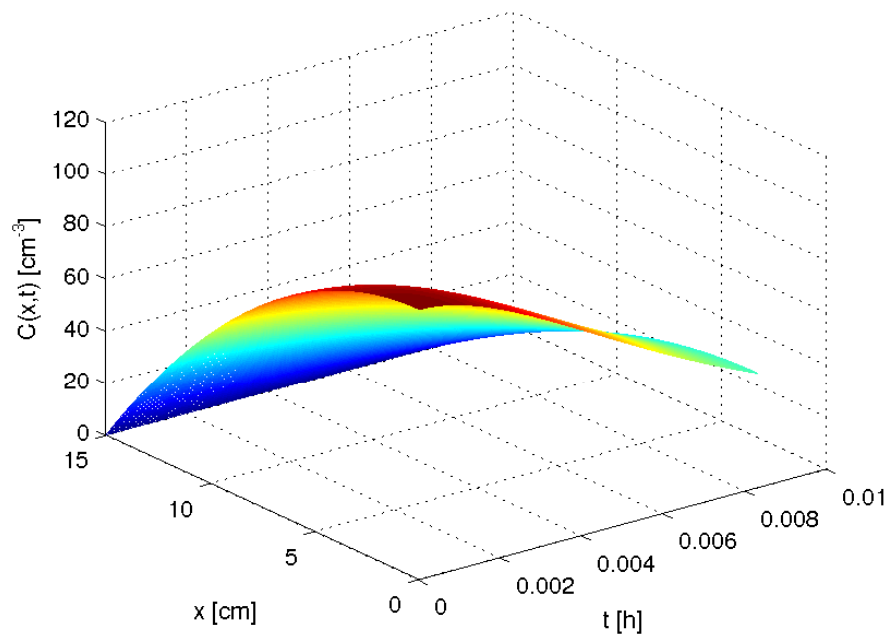


Figura D.5: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

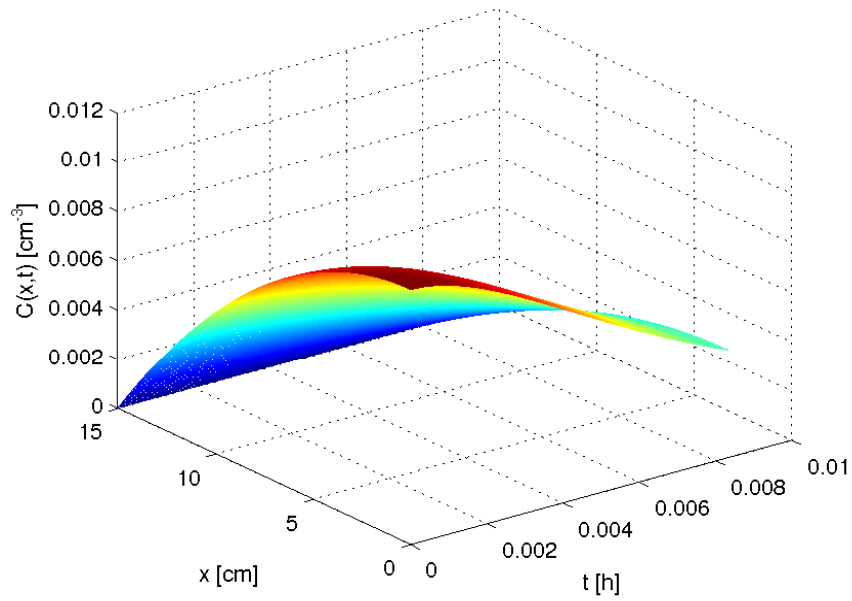


Figura D.6: Concentração de precursores de nêutrons atrasados em função de x e t com $\Sigma_a = 0,09$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

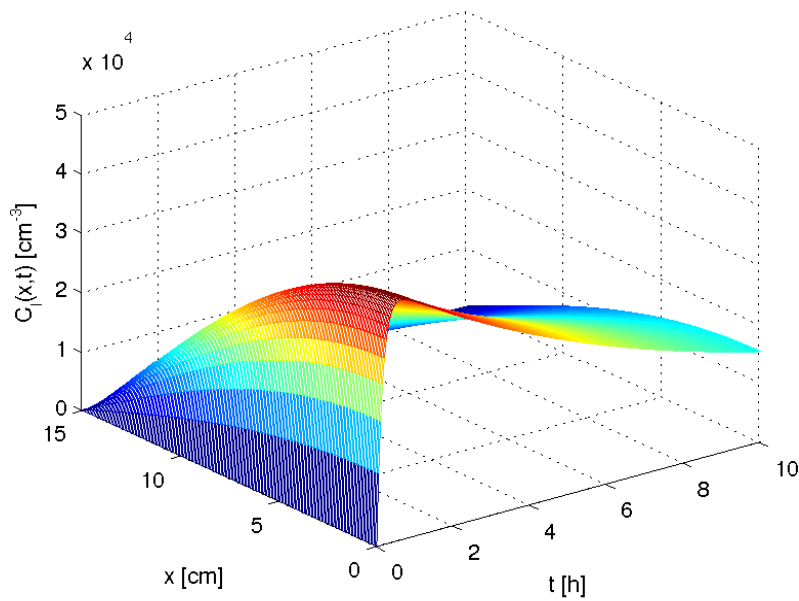


Figura D.7: Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

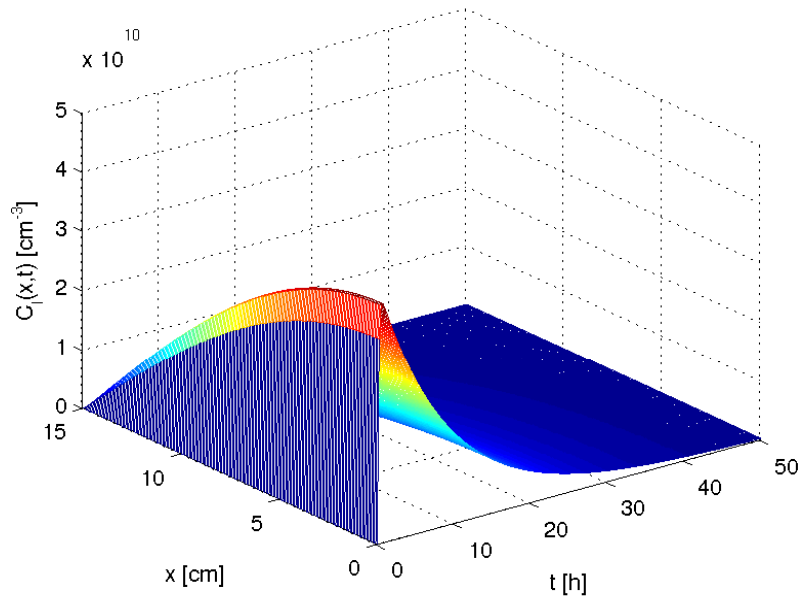


Figura D.8: Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

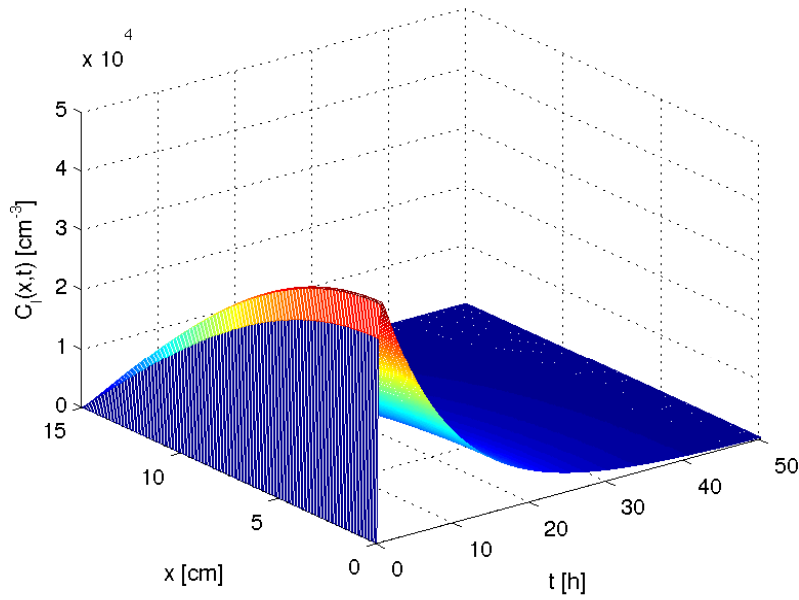


Figura D.9: Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

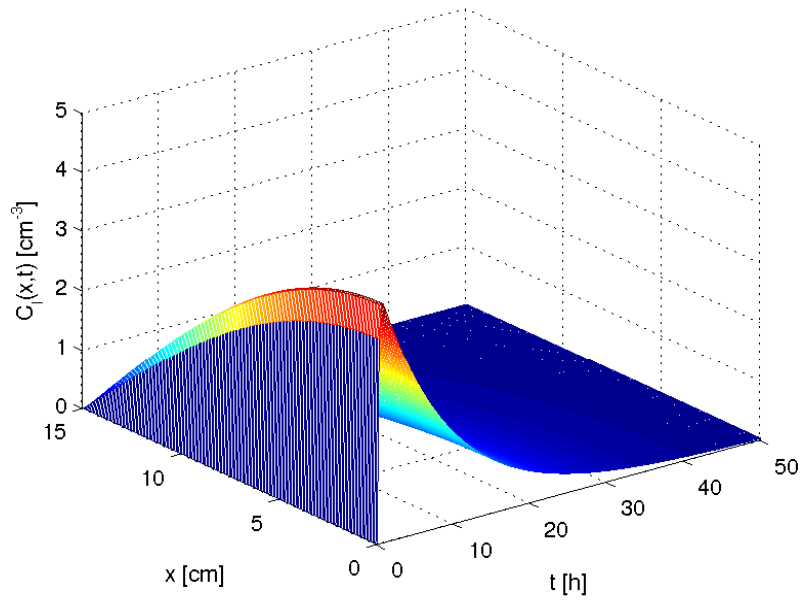


Figura D.10: Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

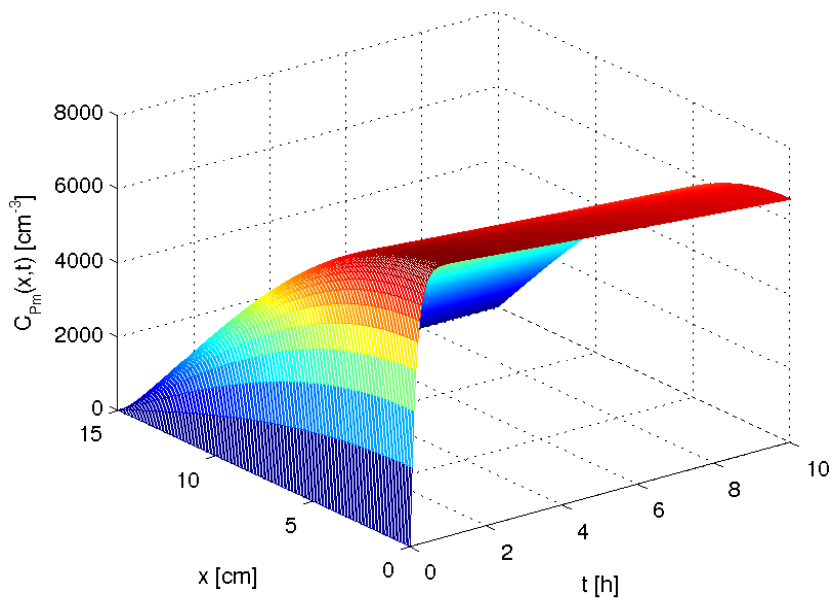


Figura D.11: Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

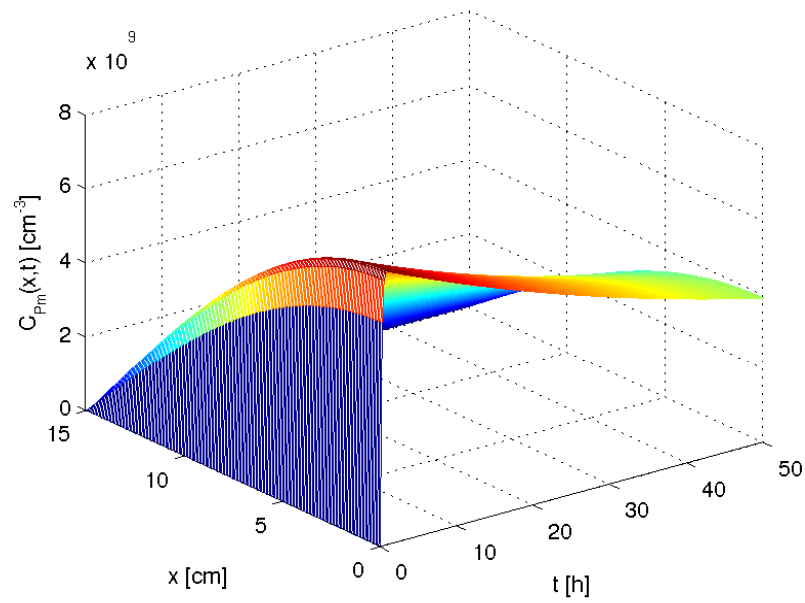


Figura D.12: Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} .

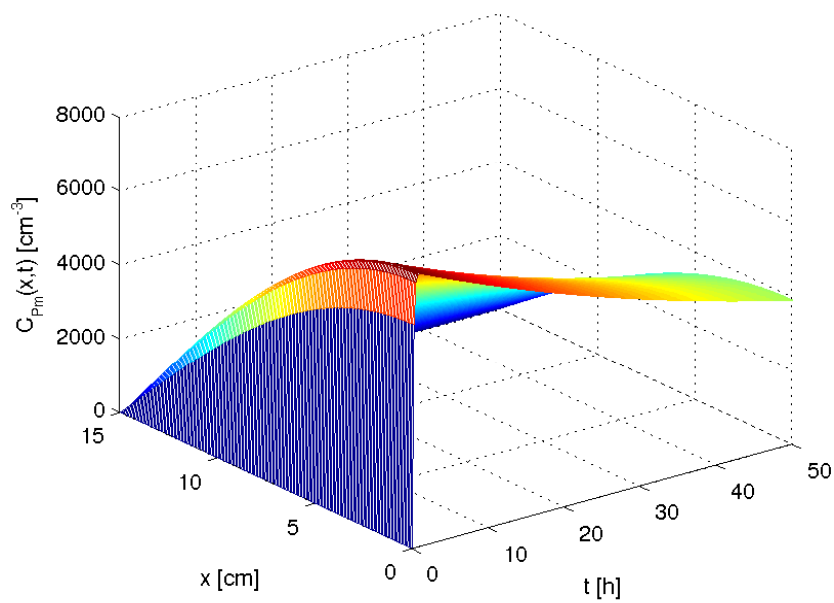


Figura D.13: Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 .

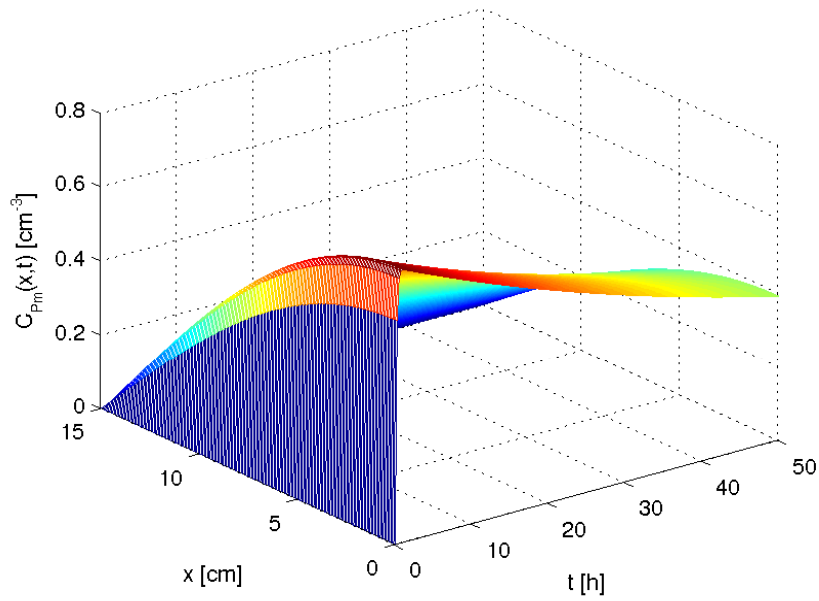


Figura D.14: Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 .

Elementos reutilizados

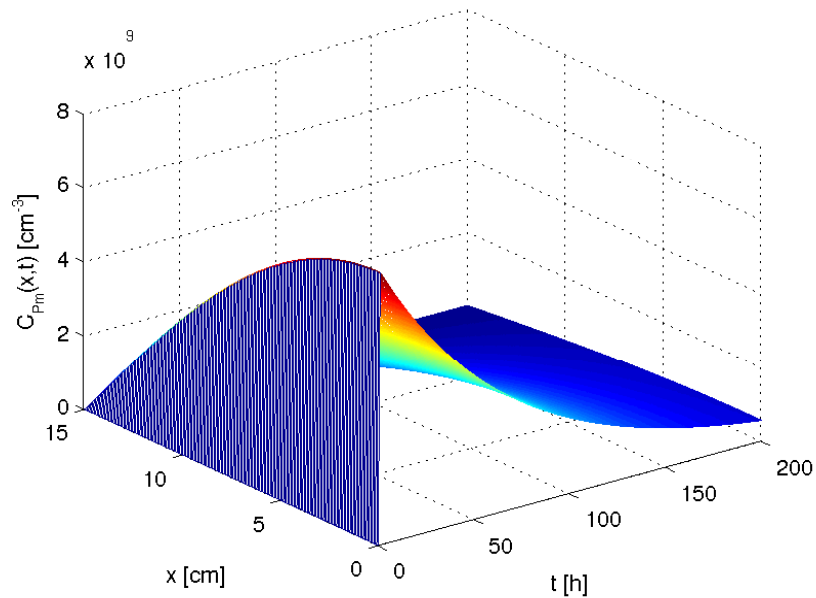


Figura D.15: Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^9 após 720 horas de reator ligado.

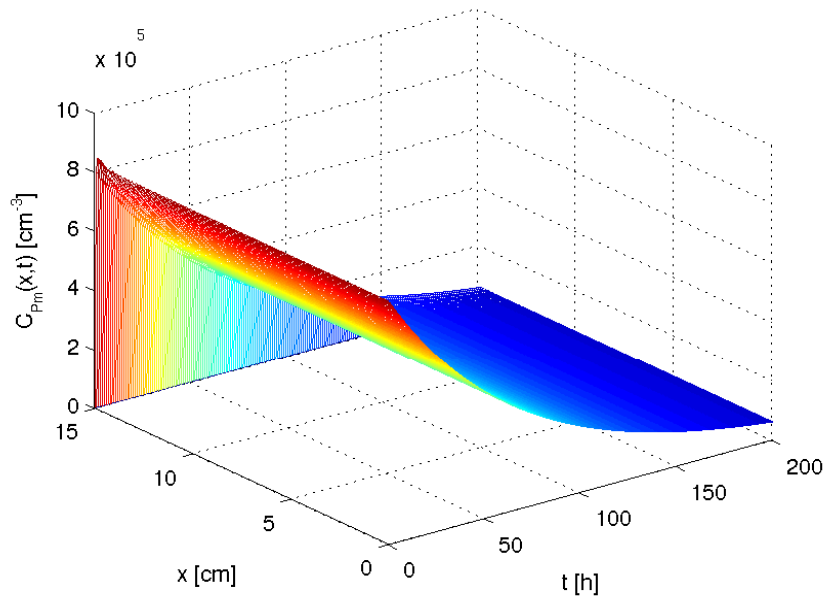


Figura D.16: Concentração de Promécio em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.

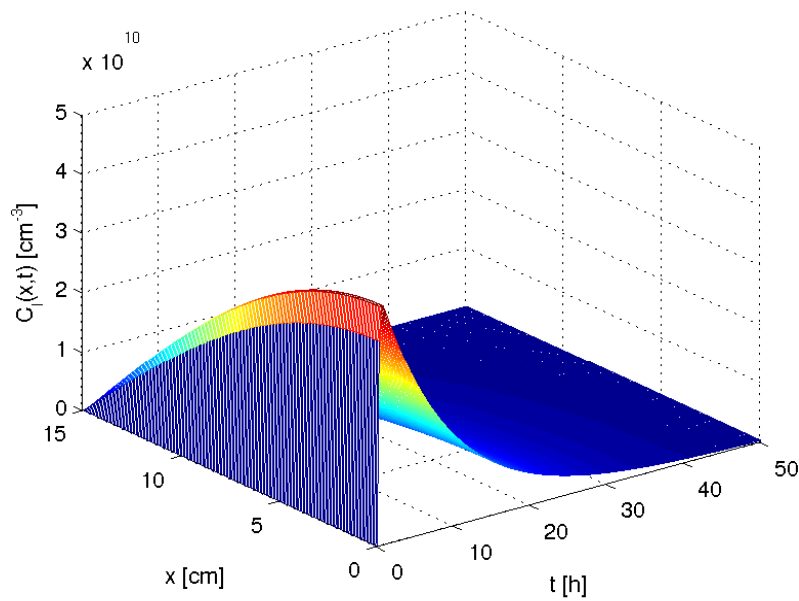


Figura D.17: Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^{14} após 720 horas de reator ligado.

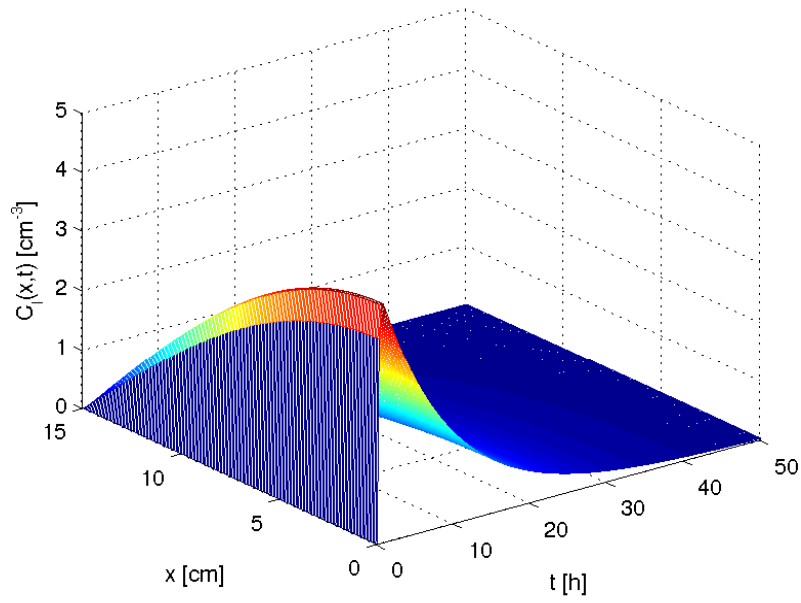


Figura D.18: Concentração de Iodo em função de x e t com $\Sigma_a = 0,026$ e ϕ_0 na ordem de 10^5 após 720 horas de reator ligado.