

INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR

WILLIAN VIEIRA DE ABREU

**ANÁLISE NUMÉRICA DE TRANSIENTES EM UM REATOR SLAB GUIADO
POR FONTE EXTERNA**

Rio de Janeiro

2017

WILLIAN VIEIRA DE ABREU

**ANÁLISE NUMÉRICA DE TRANSIENTES EM UM REATOR SLAB GUIADO
POR FONTE EXTERNA**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares do Instituto de Engenharia Nuclear da Comissão Nacional de Engenharia Nuclear como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciência e Tecnologia Nucleares.

Orientadores: Prof. Dr. Zelmo Rodrigues de Lima (PPGCTN/IEN/CNEN) e
Prof. Dr. Alessandro da Cruz Gonçalves (PEN/COPPE/UFRJ)

Rio de Janeiro

2017

ABRE Vieira de Abreu, Willian

Análise Numérica de Transientes em um Reator Slab Guiado por
Fonte Externa/

Willian Vieira de Abreu – Rio de Janeiro: CNEN /
IEN, 2017.

xiii, 95f.: il..; 31 cm

Orientadores: Zelmo Rodrigues de Lima e Alessandro da Cruz
Gonçalves.

Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Nucleares) –
Instituto de Engenharia Nuclear, PPGCTN/IEN, 2017.

1. Difusão de Nêutrons. 2. Discretização Equações Cinética
Espacial. 3. ADS. 4. Reatores Subcríticos.

**ANÁLISE NUMÉRICA DE TRANSIENTES EM UM REATOR SLAB GUIADO
POR FONTE EXTERNA**

WILLIAN VIEIRA DE ABREU

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES DO INSTITUTO DE ENGENHARIA
NUCLEAR DA COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE
MESTRE EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES.

Aprovada por:

Prof. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc.

Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves, D.Sc.

Prof. Rubens Souza dos Santos, D.S

Prof. Julio Cesar Suita, D.Sc

Prof. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

FEVEREIRO DE 2017

“... qualquer um, independente das habilitações que tenha, ao menos uma vez na vida, fez ou disse coisas muito acima da sua natureza e condição, e se a essas pessoas pudéssemos retirar do cotidiano pardo em que vão perdendo os contornos, ou elas, a si próprias por violência se retirassem de malhas ou prisões, quantas mais maravilhas seriam capazes de obrar, que pedaços de conhecimento profundo poderiam comunicar, porque cada um de nós sabe infinitamente mais do que julga e cada um dos outros infinitamente mais do que neles aceitamos reconhecer”.

José Saramago

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por me prover saúde e força durante toda esta caminhada.

Agradeço enormemente à minha família, amigos e colegas de turma, por toda compreensão e apoio durante os estudos, de forma a permitir minha chegada até aqui.

A minha mãe e tia, que me deram todo o suporte durante toda minha vida.

Agradeço a Victor e Julia, pelo enorme suporte e amizade ao longo da graduação e Mestrado.

Agradeço a todos os funcionários do IEN, por me acolherem de forma única durante todo o período do mestrado, e até durante o processo seletivo. Em especial a Dona Cláudia e Professor Suita, que por diversas vezes me receberam sempre com muita cordialidade e simpatia.

Aos meus orientadores, Zelmo e Alessandro, por estarem sempre dispostos a me ajudar em todos os momentos de dificuldade, mesmo durante finais de semana!

Aos membros da banca, Prof. Rubens Souza dos Santos, Prof. Julio Cesar Suita e Prof. Daniel Artur Pinheiro Palma por gentilmente se disponibilizarem a participar de minha banca.

A Jessica, por todo suporte e apoio nos momentos decisivos de dissertação.

À Coordenação de Ensino do PPGCTN/IEN pelo ótimo trabalho desenvolvido e por receber os alunos de braços abertos.

A CAPES por me conceder a bolsa de estudos.

RESUMO

No presente estudo objetivou-se realizar a análise das equações da cinética espacial aplicada em reatores unidimensionais tipo slab visando utilização em reatores *Accelerator-driven System* (ADS). A princípio, as equações estacionárias de nêutrons foram discretizadas por diferenças finitas com o esquema centrado na malha e, então, colocadas na forma matricial, com o fim de se monitorar o valor do K_{eff} . Posteriormente, esse parâmetro foi aplicado em códigos que resolvem as equações da cinética espacial unidimensional no reator de interesse, utilizando, como referência, o método de Euler Implícito. Além disso, também foi utilizado o método de Runge-Kutta com o controle do passo no tempo, modificado com os parâmetros de Kaps-Rentrop e de Shampine. Para certificar a correta resolução das equações da cinética por parte dos códigos, realizou-se sua validação em um Benchmark conhecido, o BSS6, dividido em dois casos: A1 e A2. Em seguida, transientes de relevância em reatores ADS e com a presença de uma fonte externa foram simulados. Com estas simulações, foi possível verificar que os códigos desenvolvidos mostraram resultados coerentes com o Benchmark, o que possibilitou a simulação dos transientes planejados. Com relação aos transientes, o código que utilizou o método de Runge-Kutta se comportou adequadamente e apresentou erros relativos percentuais abaixo de 1%, tanto para o parâmetro de Kaps-Rentrop, quanto para o parâmetro de Shampine, quando comparados ao método de Euler Implícito. Ademais, os transientes simulados através do método Runge-Kutta, independente do parâmetro, em quase todos os casos, foram mais rápidos que aqueles do método de Euler Implícito. Por fim, a partir desses dados, conclui-se que o código com controle no passo tempo foi eficiente e pode reduzir o tempo de processamento em transientes mais complexos.

Palavras-chave: Difusão de Nêutrons, Cinética Espacial, Sistemas Subcríticos.

ABSTRACT

In this study, we aimed to analyze the equations of spatial kinetics applied in one-dimensional slab reactors for use in Accelerator-driven System (ADS) reactors. At first, the neutron stationary equations were discretized by finite differences with the mesh-centered scheme and, then, placed in the matrix form to monitor the K_{eff} value. Subsequently, this parameter was applied in codes that solve the one-dimensional spatial kinetics equations in the reactor of interest, using as reference the Implicit Euler method. In addition, the Runge-Kutta method with time step control, modified with Kaps-Rentrop and Shampine parameters, was also used. In order to certify the correct resolution of the kinetic equations by the codes, their validation was performed in a known Benchmark, the BSS6, divided into two cases: A1 and A2. Thereafter, transients of relevance in ADS reactors and with the presence of an external source were simulated. With these simulations, it was possible to verify that the developed codes showed results consistent with the Benchmark, which allowed the simulation of the planned transients. Regarding the transients, the code which used the Runge-Kutta method behaved properly and presented a percentual deviation of less than 1, for both the Kaps-Rentrop and the Shampine parameters, when compared to the Implicit Euler method. In addition to that, the transients simulated through the Runge-Kutta method, independently from the parameter, in almost all cases, were faster than those which used the Implicit Euler method. Finally, from these data, it was possible to conclude that the code with control in the step time was efficient and can reduce the processing time in more complex transients.

Keywords: Spatial Kinetics, Critical Reactor, subcritical systems.

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ABI	<i>Accelerator Beam Interruptions</i>
ABO	<i>Accelerator Beam Overpower</i>
ADS	<i>Accelerator-driven System</i>
AIEA	<i>Agência Internacional de Energia Atômica</i>
FR	<i>Fast Reactor</i>
GRK	<i>Generalizado Runge Kutta</i>
S	<i>Shampine</i>
K-R GRK	<i>Método de Kaps Rentrop para a Generalização Runge Kutta</i>
MWe	<i>Megawatt elétrico</i>
MWt	<i>Megawatt térmico</i>
NEA	<i>Nuclear Energy Agency</i>
OECD	<i>Organisation for Economic Co-operation and Development</i>
RK	<i>Runge Kutta</i>
SCK-CEN	<i>Studiecentrum voor Kernenergie – Centre D'étude de L'Energie Nucleaire (Centro de Pesquisas Nucleares da Bélgica)</i>
SOR	<i>Successive Over-Relaxation</i>
WNA	<i>World Nuclear Association</i>

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Sistema tipo ADS	14
Figura 2 – Spallation	14
Figura 3 - Esquema Simplificado de um reator tipo ADS	16
Figura 4 - Design MYRRHA	18
Figura 5 - Esquema centrado na malha	28
Figura 6 - Núcleo de um reator de tamanho M	30
Figura 7 - Malha na região m	30
Figura 8 - Discretização centrada na malha	30
Figura 9 - Fluxograma de Iterações por método de potência	42
Figura 10 - Esquema de discretização no tempo	51
Figura 11 - Fluxo de Nêutrons Rápidos no BSS-6 A1	62
Figura 12 - Fluxo de Nêutrons Térmicos no BSS-6 A1	62
Figura 13 - Fluxo Rápido em $t=1$	63
Figura 14 - Fluxo Térmico em $t=1$	63
Figura 15 - Fluxo Rápido em $t=2$	64
Figura 16 - Fluxo Térmico em $t=2$	64
Figura 17 - Fluxo Rápido em $t=3$	65
Figura 18 - Fluxo Térmico em $t=3$	65
Figura 19 - Fluxo Rápido em $t=4$	66
Figura 20 - Fluxo Térmico em $t=4$	66
Figura 21 - Variação de potência relativa caso A1	67
Figura 22 - Fluxo de Nêutrons Rápidos no BSS-6 A2	68
Figura 23 - Fluxo de Nêutrons Térmicos no BSS-6 A2	68
Figura 24 - Fluxo Rápido caso 2, $t=1$	69
Figura 25 - Fluxo Térmico caso 2, $t=1$	69
Figura 26 - Fluxo Rápido caso 2, $t=2$	70
Figura 27 - Fluxo Térmico caso 2, $t=2$	70
Figura 28 - Fluxo Rápido caso 2, $t=3$	71
Figura 29 - Fluxo Térmico caso 2, $t=3$	71
Figura 30 - Fluxo Rápido caso 2, $t=4$	72
Figura 31 - Fluxo Térmico caso 2, $t=4$	72
Figura 32 - Variação da Potência relativa caso 2	73
Figura 33 - Geometria 1D para um Reator ADS	75
Figura 34 - Fluxo Rápido BSS6 ABI para $t=1$	77
Figura 35 - Fluxo Térmico BSS6 ABI para $t=1$	77
Figura 36 - Fluxo Rápido BSS6 ABI para $t=3$	78
Figura 37 - Fluxo Térmico BSS6 ABI para $t=3$	78
Figura 38 - Variação de Potência Relativa ABI	79
Figura 39 - Fluxo Rápido BSS6 ABO $t=1$	81
Figura 40 - Fluxo Térmico BSS6 ABO $t=1$	81
Figura 41 - Fluxo Rápido BSS6 ABO $t=3$	82
Figura 42 - Fluxo Térmico BSS6 ABO $t=3$	82
Figura 43 - Variação de potência relativa para ABO	83

Figura 44 - Variação Potência start da fonte	84
Figura 45 - Fluxo de Nêutrons Rápidos para o start da fonte.....	85
Figura 46 - Fluxo de Nêutrons Térmicos para o start da fonte	85
Figura 47 - Geometria do ANL-BSS-6 benchmark problem	92

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Vantagens X Desvantagens ADS de Tório	17
Tabela 2 - Tempo de Processamento BSS6 - caso 1 e caso 2	73
Tabela 3 - Tempo de Processamento - BSS6 – ABI, ABO e Start da Fonte. ...	86
Tabela 4 - Erros Relativos máximos para Kaps-Rentrop A1	87
Tabela 5 - Erros Relativos máximos para Shampine A1	87
Tabela 6 - Erros Relativos máximos para Kaps-Rentrop A2	87
Tabela 7 - Erros Relativos máximos para Shampine A2	88
Tabela 8 - Erros Relativos máximos para ABI - Kaps-Rentrop e Shampine.....	88
Tabela 9 - Erros Relativos máximos para ABO - Kaps-Rentrop e Shampine...	88
Tabela 10 - Erros Relativos Máximos para o START no tempo 10s	89
Tabela 11 - Parâmetros Nucleares.....	93
Tabela 12 - Constante dos Nêutrons Retardados	93
Tabela 13 - Velocidade dos Grupos	93

SUMÁRIO

1	Introdução.....	13
2	Dedução das equações da cinética espacial.....	21
3	Discretização da Equação de Difusão Estacionária de Nêutrons.....	27
3.1	Introdução.....	27
3.2	Método de Discretização Espacial.....	27
3.3	O método das Potências.....	39
3.4	O problema de Fonte Fixa.....	43
3.4.1	Equação da continuidade de nêutrons.....	43
3.4.2	Discretização da equação com o termo de fonte.....	43
4	Discretização das equações da cinética espacial.....	45
4.1	Introdução.....	45
4.2	Discretização espacial.....	45
4.2.1	Equação semi-discretizada.....	46
4.3	Discretização Temporal das Equações da Cinética Espacial.....	50
4.3.1	Integração Analítica da Concentração dos Precursores.....	50
4.3.2	Discretização Temporal através do método de Euler Implícito.....	52
4.3.3	Os métodos de Runge-Kutta Generalizados de Rosenbrock.....	54
4.3.4	Controle automático do passo no tempo para o K-R GRK.....	58
4.4	Discretização Temporal das Equações da Cinética Espacial com Fonte Externa.....	60
5	Resultados.....	61
5.1	Validação do código.....	61
5.1.1	Transiente de validação 1: BSS-6-A1.....	62
5.1.2	Transiente de validação 2: BSS-6-A2.....	67
5.2	Simulação de cenários de acidentes em ADS.....	74
5.2.1	Interrupção no feixe de prótons - ABI.....	75
5.2.2	Aumento na intensidade do feixe de prótons – ABO.....	79
5.2.3	<i>Start</i> da fonte externa.....	83
5.3	Análise de erro.....	86
6	Conclusões e Considerações finais.....	90
7	Apêndice.....	92
7.1	O BSS6 Benchmark.....	92
8	Referências.....	94

1 INTRODUÇÃO

O combustível de material nuclear, após ser utilizado por usinas, contém radionuclídeos. Uma parte desses radionuclídeos decai rapidamente e sua radioatividade é reduzida a um valor menor que 0,1% do valor original 50 anos após ser removido do reator (OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2002). No entanto, uma razoável quantidade do combustível usado contém actínídeos de longa meia-vida (particularmente Neptúnio, Amerício e Cúrio) que precisam ser guardados por um tempo indefinido.

Para solucionar este problema de armazenamento de longa escala, nas últimas décadas, cresceu-se o interesse por separar os actínídeos de longa meia-vida dos demais elementos presentes no combustível usado. Isso se deu com o intuito de transformá-los através da transmutação em radionuclídeos de meia-vida curta, o que torna o custo de manuseamento e armazenamento muito menor.

Esta transmutação de elementos de longa vida pode ser resolvida por um sistema composto por um reator que tenha um acelerador de partículas integrado. Este sistema é conhecido como Accelerator-Driven System (ADS). Um sistema tipo ADS pode ser utilizado para produzir energia, bem como para a queima de actínídeos menores.

Como é possível observar na figura 1 a seguir, os aceleradores atuais são capazes de produzir nêutrons através de *spallation* a partir de elementos pesados. Neste processo, ilustrado na figura 2, um feixe de prótons de alta energia (normalmente > 500 MeV) é direcionado a um alvo de alto número atômico (como o tungstênio, tântalo, urânio empobrecido, tório, etc) produzindo aproximadamente um nêutron a cada 25 MeV do feixe incidente de prótons (WORLD NUCLEAR ASSOCIATION, 2016). Essa é uma forma vantajosa de gerar nêutrons, pois esse processo tem uma pequena probabilidade de gerar eventos de fissão adicional no alvo. Entretanto, vale considerar que esse alvo ainda precisa ser esfriado por causa do aquecimento gerado pelo feixe incidente.

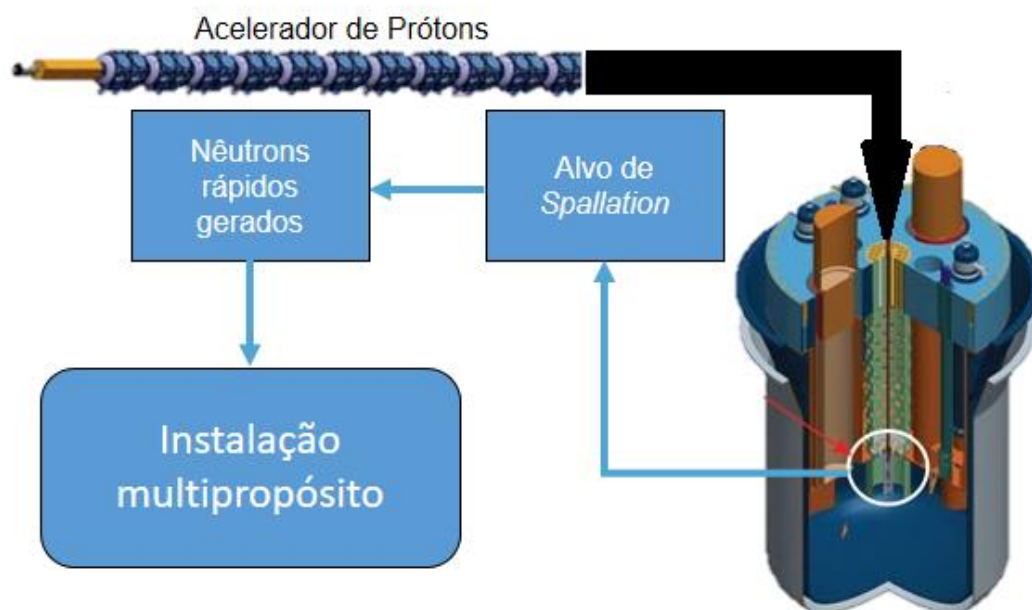


Figura 1 - Sistema tipo ADS¹

Se o alvo (fonte de *spallation*) é rodeado por elementos combustíveis de combustível nuclear, como Urânio, Plutônio ou Tório, existe a possibilidade de que a reação de fissão seja sustentada. Esse processo é o que define um sistema como sendo tipo ADS.

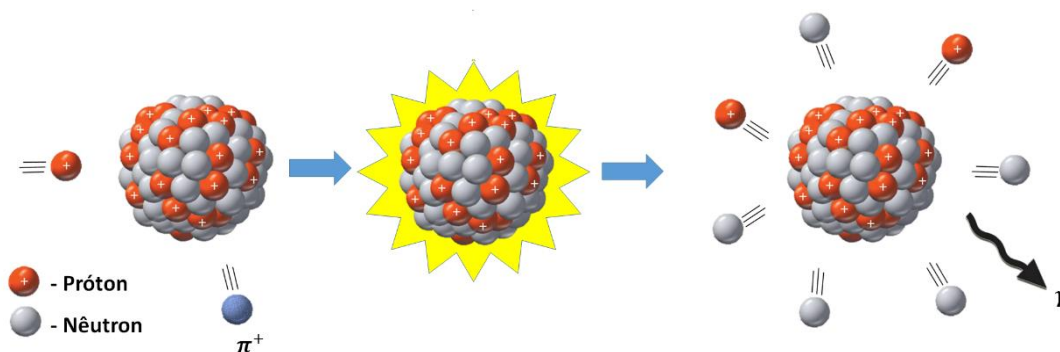


Figura 2 – Spallation

¹ Fonte: Adaptada de (SCK-CEN, 2017). Utilizada sob permissão.

Até 10% dos nêutrons podem vir do processo de *spallation* (OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2002). Contudo, o padrão normal é um valor menor que este, com os demais nêutrons sendo provenientes do ato da fissão provindos dos elementos combustíveis ao redor do alvo. Isto quer dizer que esse sistema só pode funcionar quando está sendo alimentado com os nêutrons provenientes do *spallation* gerado pelo acelerador acoplado, pois o material que compõe os elementos combustíveis não possui uma taxa de fissão por captura alta suficiente para manter uma reação de fissão por si só.

Uma vez que existe um sistema, que para ser desligado precise apenas que o acelerador de partículas seja desligado, sem a necessidade da utilização de barras de controle para retirar a criticalidade do reator, deixa claro a maior segurança em relação aos reatores de fissão padrões comumente utilizados pelo Mundo.

Como foi ilustrado na Figura 1, um sistema tipo ADS pode ser utilizado para diferentes propósitos principais. Dentre eles, podemos enfatizar dois tipos: geração de energia com a utilização de Tório e incinerador de elementos de longa vida.

O interesse na utilização do Tório 232 como combustível nuclear vem sendo discutido há muitos anos, já que este elemento é de três a cinco vezes mais abundante na crosta terrestre que o Urânio (WORLD NUCLEAR ASSOCIATION, 2016). Adicionado a isso, um reator a Tório funciona pela captura de um nêutron que se transforma em Th-233 que decai para o Urânio 233, que por sua vez é físsil.

Porém, esse processo não produz uma quantidade de nêutrons suficiente para manter o sistema ativo, de forma que acaba sendo necessário a utilização de elementos como o plutônio ou Urânio enriquecido, a não ser que seja utilizado num reator de nêutrons rápidos (OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2002).

O uso de aceleradores nesse processo é uma alternativa viável. O conceito de um ADS baseado em Tório 233 funcionaria a partir de um núcleo composto em sua maior parte por Tório, contido em um tanque de aproximadamente 25 metros preenchido por Chumbo Líquido ou Chumbo-Bismuto a altas temperaturas, que serviria como refrigerante primário e circularia por convecção

através do núcleo. Fora do tanque, existiria um vão de ar para remover o calor, se necessário.

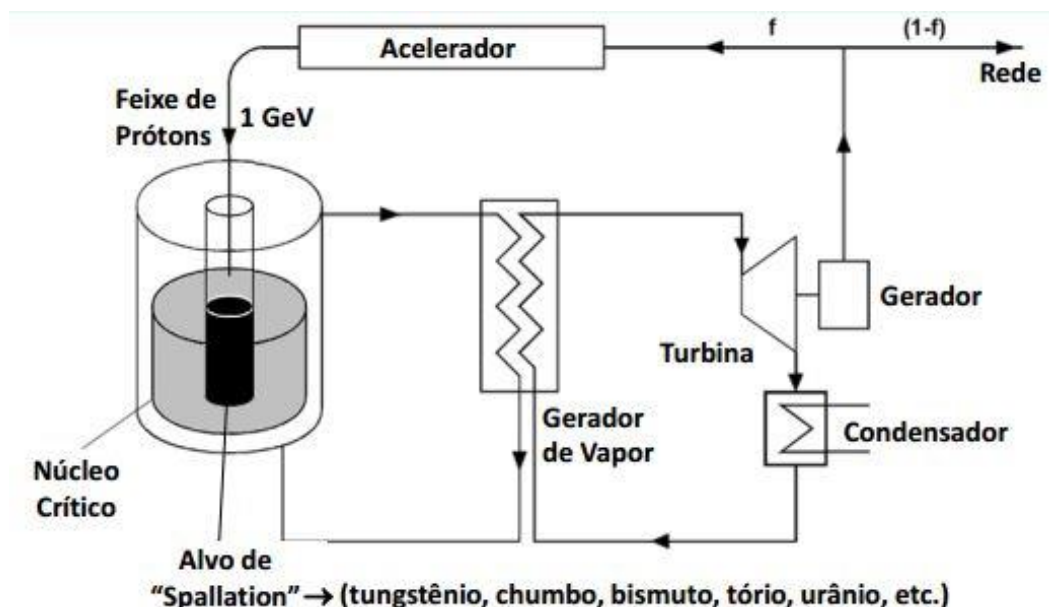


Figura 3 - Esquema Simplificado de um reator tipo ADS²

Assim sendo, o acelerador proveria um feixe de prótons de alta energia, que se chocaria com o alvo de *spallation*, fornecendo, então, os nêutrons necessários para a transmutação do Tório.

No atual momento, alguns projetos de reatores estão sendo desenvolvidos dessa forma. Um exemplo é um reator proposto conjuntamente pelo Reino Unido e Suíça, que produziria 600 MWe que usaria o Plutônio como elemento de fissão inicial. Este processo está em fase de estudo de viabilidade e tem como vantagem a utilização de um feixe de prótons menos energético do que os demais propostos (3-4 MW em vez de 10 MW). É conveniente lembrar que atualmente os aceleradores existentes trabalham em torno de 1 MW (WORLD NUCLEAR ASSOCIATION, 2016).

Em 2008, um estudo do Thorium Report Committee (2008) listou as vantagens e desvantagens de um Reator tipo ADS regido por Tório, comparado a um reator normal, as quais estão apresentadas na tabela 1 a seguir:

² Fonte: (DE LIMA, 2005)

Tabela 1 - Vantagens X Desvantagens ADS de Tório³

Vantagens	Desvantagens
Menor produção de actínídeos de longa meia-vida	Maior produção de isótopos radioativos voláteis no alvo de <i>spallation</i>
Sistema de baixa pressão	Mais complexo
Queima eficiente de actínídeos menores	Produção de energia menos confiável devido a quedas do acelerador
Mínima probabilidade de Escape	O tubo do feixe pode quebrar as barreiras de contenção

Ainda de acordo com Thorium Report Committee (2008), não será possível ter um sistema desse tipo em funcionamento em um tempo menor que 30 anos, devido à grande necessidade de desenvolvimento de pesquisas na área e dos aceleradores.

Um sistema ADS também pode ser utilizado para tratar o problema de isótopos pesados, em especial, actínídeos produzidos no combustível usado dos reatores tradicionais. Neste caso, os elementos combustíveis seriam compostos de actínídeos e/ou combustível usado de reatores tradicionais, que poderiam utilizar ou não a mesma configuração do reator tradicional.

ADS também podem ser utilizados para lidar com produtos de fissão de longa meia-vida, como o Tecnécio 99 e o Iodo 129 (com 213.000 e 16 milhões de anos de meia-vida, respectivamente). Esses elementos podem adquirir um nêutron e se tornar elementos que possuem uma meia vida muito curta, decaindo para Ru 100 e Xe 130, que são estáveis.

A viabilidade comercial deste processo ainda é algo distante, pois é necessário realizar a separação dos actínídeos dos elementos estáveis do combustível usado para que não ocorra a transformação de elementos já estáveis em elementos instáveis novamente.

³ Fonte: (OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2002)

O primeiro experimento envolvendo ADS foi iniciado em março de 2009, no Instituto de Reatores de Pesquisa da Universidade de Kyoto (KURRI), seis anos após o projeto ter sido comissionado pelo Ministro da educação, cultura, ciência e tecnologia do Japão (WORLD NUCLEAR ASSOCIATION, 2016).

O experimento irradia um feixe de próton de alta energia (100 MeV) do acelerador em direção de um alvo de *spallation* composto de um metal pesado, produzindo nêutrons que irão bombardear os elementos combustíveis dentro do núcleo subcrítico.

Um dos mais famosos projetos ADS no mundo é o MYRRHA, que está sendo desenvolvido pelo Centro de Pesquisas Nucleares da Bélgica (SCK-CEN), localizando em Mol, na Bélgica.

MYRRHA é um reator de pesquisa tipo ADS de espectro rápido (50-100 MWt), que será apto a trabalhar em modo subcrítico e crítico. Ele terá um acelerador de prótons de 600 MeV, um alvo de *spallation* e um núcleo multiplicador com combustível tipo Mixed Oxide Fuel (MOX), resfriado por uma liga de chumbo-bismuto líquido (SCK-CEN, 2017).

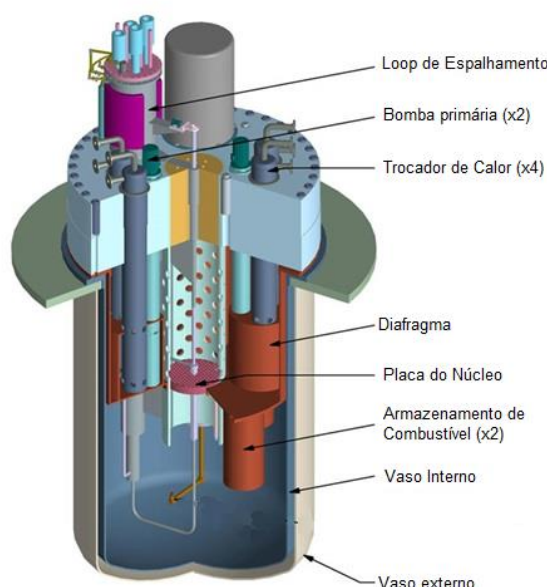


Figura 4 - Design MYRRHA⁴

⁴ Disponível em <<http://myrrha.sckcen.be/en/MYRRHA/Design>>. Data acesso: 15 de Janeiro de 2017. (SCK-CEN, 2017). Utilizada sob permissão

A Índia, que possui uma das maiores reservas de Tório do mundo e tem muito interesse em desenvolver reatores tipo ADS baseados neste elemento, também possui projetos em andamento.

Em 2014, foi aprovada a construção na cidade de Lund, Suécia, a instalação chamada *European Spallation Source* (ESS), que quando pronta será a mais poderosa fonte de nêutrons do mundo. Ela foi desenhada em torno de um acelerador linear que produzirá pulsos intensos de nêutrons provindos de um alvo feito de metal pesado. De acordo com a ESS, o feixe de nêutrons produzido será 30 vezes mais nítido do que qualquer outra fonte de nêutrons atual (WORLD NUCLEAR ASSOCIATION, 2016). Sua previsão de pleno funcionamento é de 2025.

Diante desse cenário, o presente trabalho tem como principal objetivo estudar numericamente solução das equações da cinética espacial para transientes em uma dimensão, que possam vir a ocorrer em sistemas subcríticos. No caso dos sistemas tipo ADS, os transientes relacionados com um comportamento anômalo ou um desligamento inesperado da fonte, bem como a estabilidade do núcleo, são de extrema importância na análise de segurança para tais sistemas.

Espera-se neste estudo implementar, também, um código computacional, programado em linguagem Fortran, que possa monitorar o erro de truncamento associado à discretização temporal, possibilitando, assim, um controle automático no tamanho do passo no tempo.

O texto dessa dissertação está dividido em cinco capítulos. No capítulo 2, será realizada a dedução das equações da cinética espacial, que são fundamentais para o presente trabalho, a partir da equação contínua de transporte de energia. No capítulo 3, a discretização por diferenças finitas da equação da continuidade de nêutrons, no esquema centrado na malha para o chamado problema de autovalor será apresentada. Após isso, passaremos para a determinação do maior autovalor K_{eff} e o autovetor a ele associado ϕ , utilizando-se do método das potências. O Cálculo do fluxo estacionário é um passo importante para o presente trabalho pois ele fornece o valor do fluxo inicial para que sejam simulados os transientes desejados.

No capítulo 4, serão apresentadas as discretizações das equações da cinética espacial unidimensional a dois grupos de energia e seis grupos de precursores, através do método de diferenças finitas para a parte espacial. Associado a isso, serão realizadas a integração analítica da equação da concentração dos precursores e a discretização temporal através dos métodos de Euler Implícito e Runge-Kutta com o controle automático do passo no tempo, utilizando-se de dois “sets” de parâmetros diferentes: Kaps-Rentrop e Shampine.

No capítulo 5, apresentaremos os resultados e discussões das simulações realizadas e, por fim, no capítulo 6, as conclusões obtidas com esta dissertação. No Apêndice, encontram-se ainda o padrão de reator utilizado (BSS6), bem como seus dados nucleares.

2 DEDUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL

Devido à enorme importância para o presente trabalho, inicialmente, será feito um esboço da dedução da equação de difusão dependente do tempo a partir da equação contínua de transporte de energia de acordo com Sutton e Aviles (1996).

Tem-se que o comportamento de nêutrons em um reator nuclear pode ser descrita adequadamente a partir da equação de transporte de Boltzmann dependente do tempo para o fluxo angular (SUTTON e AVILES, 1996):

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, \Omega, E, t) = -\Omega \cdot \nabla \phi(r, \Omega, E, t) - \Sigma_t(r, E, t) \cdot \phi(r, \Omega, E, t) + Q(r, \Omega, E, t)$$

$$Q(r, \Omega, E, t) = \int d\Omega' \int dE' \Sigma_s(r, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E, t) \phi(r, \Omega', E', t)$$

$$+ (1 - \beta) \frac{\chi_0(E)}{4\pi} \int dE' v \Sigma_f(r, E', t) \int d\Omega' \phi(r, \Omega', E', t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \frac{\chi_l(E)}{4\pi} C_l(r, t)$$

(2.1)

onde temos a seguinte nomenclatura

L = Número total de grupos de precursores de nêutrons atrasados;

$\phi(r, \Omega, E, t)$ = Fluxo angular de nêutrons numa posição r , ângulo Ω energia E e tempo t ;

$C_l(r,t)$	=	Concentração de precursores de nêutrons retardados no grupo l , num ponto (r) e tempo t (núcleo/cm ³ s);
β	=	Fração de nêutrons retardados;
λ_l	=	Constante de decaimento dos precursores de nêutrons retardados no grupo l , (sec ⁻¹);
v_g	=	Velocidade de nêutrons no grupo g ;
$\Sigma_t(r,t)$	=	Seção de choque macroscópica total, num ponto (r) e tempo t (cm ⁻¹);
$\Sigma_s(r,\Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E, t)$	=	Seção de choque macroscópica de espalhamento duplamente diferencial;
$\nu \Sigma_f(r, E', t)$	=	Número médio de nêutrons emitidos por fissão multiplicado pela seção de choque macroscópica de fissão no grupo g , num ponto r , Energia E' e tempo t (cm ⁻¹);
χ_0	=	Espectro de energia dos nêutrons gerados por fissão;
χ_l	=	Espectro de energia dos nêutrons gerados por decaimento.

A equação de precursores satisfaz a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(r, t) = \beta_l \int dE \nu \Sigma_f(r, E', t) \int d\Omega' \varphi(r, \Omega', E', t) - \lambda_l C_l(r, t), \quad (2.2)$$

$$l = 1, \dots, L.$$

É importante ser notado que nas equações (2.1) e (2.2) foi assumido que os parâmetros de nêutrons atrasados independem da posição. Esse fato não é verdadeiro em geral, caso exista no sistema mais de um elemento fissionável. Esta consideração foi feita somente para facilitar na representação destas notações.

Soluções numéricas para a equação de transporte acoplada a equações de precursores aplicadas em problemas de cinética de reatores são de extrema dificuldade, portanto, é preciso que sejam aplicados métodos de aproximação.

A dedução da equação de difusão através da equação de transporte que será realizada adiante é facilmente encontrada na literatura, incluindo em Duderstadt e Hamilton (1976) e Sutton e Aviles (1996).

Para começar, é necessário realizar as definições de fluxo escalar de nêutrons e corrente de nêutrons:

$$\phi \equiv \phi(r, E, t) = \int d\Omega \cdot \varphi(r, E, \Omega, t)$$

$$\vec{J} \equiv \vec{J}(r, E, t) = \int d\Omega \cdot \hat{\Omega} \cdot \varphi(r, E, \Omega, t).$$

Para obter se a equação da difusão de nêutrons é preciso considerar o fluxo angular de nêutrons e o espalhamento diferencial linearmente anisotrópico, de forma que:

$$\varphi(r, \Omega, E, t) \cong \frac{1}{4\pi} \left[\phi(r, E, t) + 3\hat{\Omega} \cdot \vec{J}(r, E, t) \right]. \quad (2.3a)$$

$$\Sigma_s(r, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E, t) \cong \frac{1}{4\pi} \Sigma_s(r, E' \rightarrow E, t) +$$

$$+ \frac{3}{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}' \Sigma_{s1}(r, E', t) \delta(E' - E) \quad (2.3b)$$

Integrando a equação (2.1) sobre a variável angular e utilizando a aproximação P1 dada pelas equações (2.3.a) e (2.3b), chega-se à seguinte equação:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, E, t) = -\nabla \cdot J(r, E, t) - \Sigma_t(r, E, t) \cdot \phi(r, E, t) + q(r, E, t)$$

$$q(r, E, t) = \int dE' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E, t) \phi(r, E', t) \quad (2.3c)$$

$$+ (1 - \beta) \chi_0(E) \int dE' v \Sigma_f(r, E', t) \phi(r, E', t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_l(E) C_l(r, t)$$

A equação de precursores também pode ser representada em termos do fluxo escalar:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(r, t) = \beta_l \int dE v \Sigma_f(r, E', t) \phi(r, E', t) - \lambda_l C_l(r, t), l = 1, \dots, L \quad (2.4)$$

Multiplicando-se a equação (2.1) por Ω e integrando sobre o ângulo sólido $d\Omega$, e usando a aproximação P1 dada pelas equações (2.3.a) e (2.3b) obtém-se:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \vec{J}(r, E, t) + \Sigma_{tr}(r, E, t) \cdot \vec{J}(r, E, t) = -\frac{1}{3} \nabla \cdot \phi(r, E, t) \quad (2.5)$$

onde é Σ_{tr} seção de choque macroscópica de transporte e D o coeficiente de difusão:

$$\Sigma_{tr}(r, E, t) \equiv \Sigma_t(r, E, t) - \Sigma_{s1}(r, E, t) \quad (2.6a)$$

$$D(r, E, t) \equiv \frac{1}{3\Sigma_{tr}(r, E, t)}. \quad (2.6b)$$

Admitindo que $\frac{1}{|J|} \frac{\partial}{\partial t} |J| \ll v\Sigma_t$, chega-se a finalmente a Lei de Fick para difusão de nêutrons.

$$\vec{J}(r, E, t) = -D(r, E, t) \nabla \cdot \phi(r, E, t). \quad (2.6c)$$

Substituindo-se a equação (2.6b) na equação (2.3c) chega-se, finalmente, na equação da difusão de nêutrons dependente do tempo considerando os precursores de neutros atrasados.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, E, t) &= -\nabla \cdot D(r, E, t) \nabla \phi(r, E, t) - \Sigma_t(r, E, t) \cdot \phi(r, E, t) + q(r, E, t) \\
&+ (1 - \beta) \chi_0(E) \int dE' v \Sigma_f(r, E', t) \phi(r, E', t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_l(E) C_l(r, t) \\
q(r, E, t) &= \int dE' \Sigma_s(r, E' \rightarrow E, t) \phi(r, E', t)
\end{aligned}
\tag{2.6d}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(r, t) = \beta_l \int dE v \Sigma_f(r, E', t) \phi(r, E', t) - \lambda_l C_l(r, t), l = 1, \dots, L.$$

A dependência energética da equação da difusão nêutrons pode ser simplificada através da formulação multigrupo conforme apresentado por Duderstadt e Hamilton (1976). Assim sendo, o conjunto de equações (2.6d) admite a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(r, t) &= \nabla \cdot D_g(r, t) \nabla \phi_g(r, t) - \Sigma_{R,g}(r, t) \cdot \phi_g(r, t) + q_g(r, t) + S(r, t), g = 1, \dots, G \\
q_g(r, t) &= \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,gg'}(r, t) \phi_{g'}(r, t) + (1 - \beta) \chi_{0,g}(E) \sum_{g'=1}^G v \Sigma_f(r, t) \phi_{g'}(r, t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{l,g} C_l(r, t)
\end{aligned}
\tag{2.7}$$

e

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(r, t) = \beta_l \sum_{g=1}^G v \Sigma_{f,g}(r, t) \phi_g(r, t) - \lambda_l C_l(r, t), l = 1, \dots, L
\tag{2.8}$$

onde $\Sigma_{r,g}$ é a seção de choque de remoção do grupo g, que foi dividido em grupo térmico e grupo rápido:

$$\Sigma_{R,g}(r, t) = \Sigma_{a,g}(r, t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sgg'}(r, t).
\tag{2.9}$$

Destaca-se que foi adicionado um fator associado à uma fonte externa $S(r, t)$, que será trabalhado no capítulo 3.

Onde:

$\phi_g \Rightarrow$ Fluxos de nêutrons em cada grupo de energia (g=1,2)

$D_g \Rightarrow$ Coeficiente de difusão em cada grupo (g=1,2)

$\Sigma_{Rg}, \Sigma_{fg}^j, \Sigma_{sgg'} \Rightarrow$ Seções de choque macroscópica em cada grupo de energia (g=1,2)

$\chi_g^j \Rightarrow$ Espectro de energia para nêutrons em cada grupo, para cada isótopo físsil.

3 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO ESTACIONÁRIA DE NÊUTRONS

3.1 Introdução

Para que seja possível trabalhar com as equações de difusão computacionalmente, é necessário que sejam realizadas discretizações, sejam elas espaciais ou temporais, para cada termo das equações.

No presente capítulo, será trabalhada a discretização da equação estacionária da continuidade de nêutrons usando dois grupos de energia, com fator de multiplicação k_{eff} , conhecido como problema de autovalor. Essa discretização será realizada através do método de diferenças finitas e no esquema centrado na malha, de acordo com Alvim (2007).

O cálculo estacionário é um passo importante para o presente trabalho, pois ele fornece o valor do fluxo inicial para que sejam simulados os transientes desejados e, além disso, determina o nível de criticalidade do sistema, calculando o fator de multiplicação efetivo. Em seguida, no próximo capítulo, parte-se para as equações da cinética espacial e suas discretizações, tanto no espaço quanto no tempo, passando pelos métodos de potência e Euler Implícito.

Posteriormente, será apresentado o método Runge-Kutta generalizado (KAPS e RENTROP, 1979) para que a discretização temporal seja feita de forma com que seja possível controlar o passo no tempo para uma análise de transientes mais efetiva (VERDÚ, GINESTAR, *et al.*, 1995). Por fim, as discretizações serão transformadas em um código desenvolvido em FORTRAN®. (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992)

3.2 Método de Discretização Espacial

A equação de difusão, na forma multigrupo e estacionária, sem considerar os precursores ou nêutrons atrasados, é dada por:

$$-\nabla \cdot [D_g(r) \nabla \phi_g(r)] + \Sigma_{Rg}(r) \phi_g(r) =$$

$$\sum_{g'=1}^G \left\{ \frac{1}{k} \chi_g^j v^j \Sigma_{fg'}^j(r) + \Sigma_{sgg'}(r) \right\} \phi_g(r). \quad (3.1)$$

No presente trabalho, tem-se a intenção de simular transientes em um reator unidimensional tipo slab, especificado no apêndice. Portanto, se a equação (2.1) for considerada, apenas para uma dimensão, tem-se:

$$\begin{aligned} -\frac{d}{dx} D_g(x) \frac{d\phi(x)}{dx} + \Sigma_{Rg}(x) \phi_g(x) \\ = \frac{1}{k} \chi_g^j \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}(x) \phi_{g'}(x) + \sum_{g'=1}^2 \Sigma_{sgg'}(x) \phi_{g'}(x). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Então, é feita uma divisão em um número finito dos intervalos por partes, como demonstra a figura a seguir.

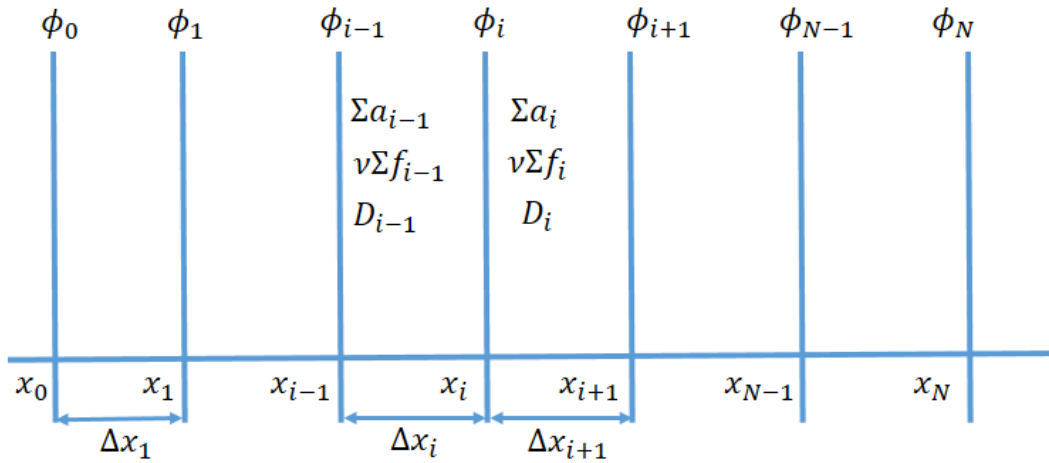


Figura 5 - Esquema centrado na malha

Como os valores de $\phi_g(x)$ e $\frac{d}{dx} D_g(x)$ são contínuos no domínio (a,b) e $D_g(x)$ é apenas contínua por partes, é necessário realizar a consideração:

$$D_g(x_0^-) \frac{d\phi_g(x_0^-)}{dx} = D_g(x_0^+) \frac{d\phi_g(x_0^+)}{dx}, \quad a < x_0 < b. \quad (3.3)$$

Para as condições de contorno ($x = a$ e $x = b$), chega-se a seguinte consideração:

$$\alpha \phi_g(x) + \beta \frac{d\phi_g(x)}{dx} = 0 \quad (3.4)$$

onde:

- Se $\beta = 0$, teremos fluxo nulo ($\phi_g(x) = 0$)
- Se $\alpha = 0$, teremos condição de corrente nula: $D_g \frac{d\phi_g(x)}{dx} = 0$
- Se $\alpha, \beta \neq 0$, tem-se a chamada condição de albedo: $D_g \frac{d\phi_g(x)}{dx} = \gamma \phi$.

Para encontrar o valor de k_{eff} , consideramos a teoria de difusão para dois grupos de energia, escrevendo a equação de difusão de dois grupos da seguinte forma e considerando $\chi_1 = 1$ e $\chi_2 = 0$:

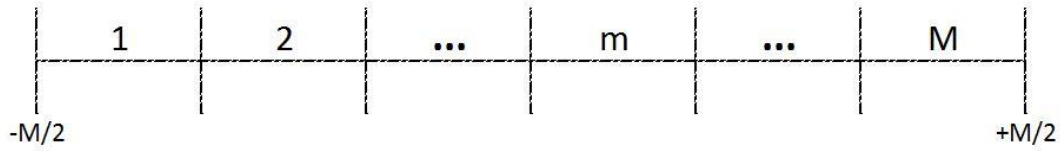
$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} J_1(x) + \Sigma_{R1}(x) \phi_1(x) &= \frac{1}{k_{eff}} [\nu \Sigma_{f1}(x) \phi_1(x) + \nu \Sigma_{f2}(x) \phi_2(x)] \\ \frac{d}{dx} J_2(x) + \Sigma_{a2}(x) \phi_2(x) &= \Sigma_{s12}(x) \phi_1(x) \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde:

$$J_g(x) \cong -D_g(x) \frac{d\phi(x)}{dx}.$$

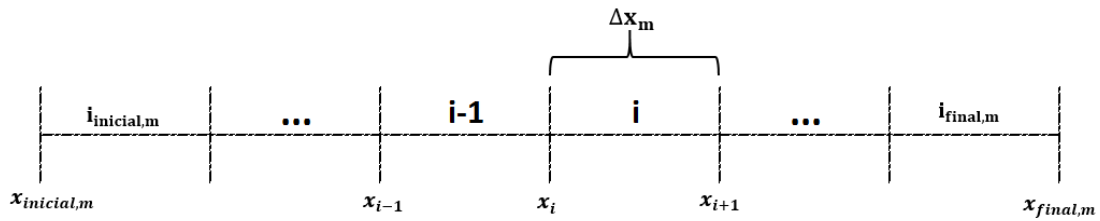
Feito isso, é possível realizar a discretização com o objetivo de se obter a solução da equação de continuidade pelo método de diferenças finitas.

Considera-se que um núcleo do reator de dimensão a seja dividido em M regiões de tamanho uniforme, conforme mostrado na figura a seguir:

Figura 6 - Núcleo de um reator de tamanho M

Dividindo uma região arbitrária m em malhas discretas de tamanho constante Δx_m , de modo que $i_{inicial,m}$ seja a malha inicial da região m e $i_{final,m}$ a malha final da região m , conforme mostrado na figura a seguir.

$$\Delta x_m = x_{i+1} - x_i, m; \quad \forall m = 1, M. \quad (3.6)$$

Figura 7 - Malha na região m

A partir do processo de discretização do núcleo, pode-se definir o fluxo médio na malha no grupo g , através do método de diferenças finitas centrada na malha.

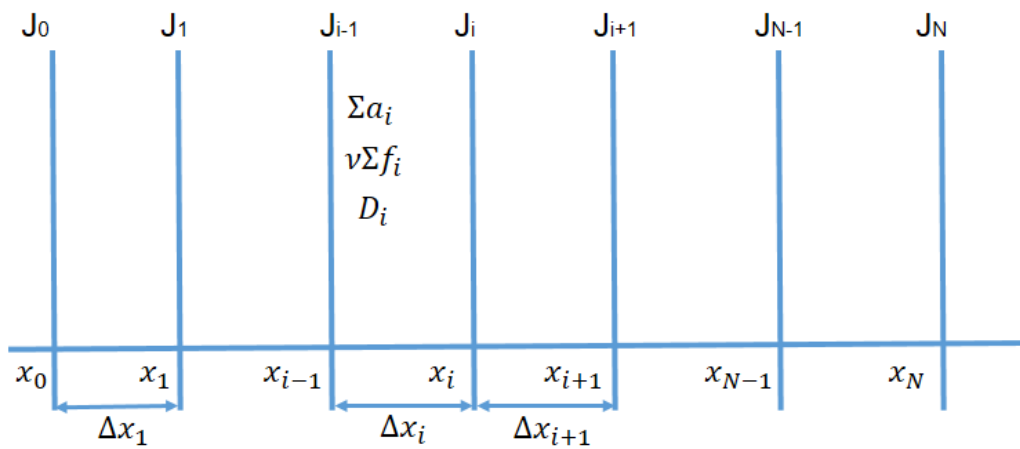


Figura 8 - Discretização centrada na malha

Neste esquema, a discretização ocorre trabalhando com os valores médios dos fluxos de malha, e da derivada do fluxo, num ponto x_i da região arbitrária m :

$$\bar{\phi}_g^n = \frac{\int_{x_i}^{x_{i+1}} \phi_g(x) dx}{\Delta x_i} \quad (3.7)$$

$$\left. \frac{d\phi_g(x)}{dx} \right|_{x=x_i} = \frac{\phi_g(x_{i+1}) - \phi_g(x_i)}{\Delta x_i}. \quad (3.8)$$

Integrando-se a equação da equação da difusão multigrupo, equação (3.5), no intervalo $[x_i, x_{i+1}]$ na região arbitrária m , tal que os parâmetros nucleares são uniformes, e aplicando-se as definições das equações (3.7) e (3.8), obtém-se a seguinte equação:

$$\begin{aligned} J_1(x_{i+1}) - J_1(x_i) + \Sigma_{R1} \Delta x_{i,m} \bar{\phi}_1 &= \frac{1}{k_{eff}} [\nu \Sigma_{f1}(x) \bar{\phi}_1(x) + \nu \Sigma_{f2}(x) \bar{\phi}_2(x)] \Delta x_{i,m} \\ J_2(x_{i+1}) - J_2(x_i) + \Sigma_{a2} \Delta x_{i,m} \bar{\phi}_2 &= \Sigma_{s12}(x) \phi_1(x) \Delta x_{i,m}. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Após chegar-se a expressão (3.9), será necessária a obtenção de uma expressão para J_i em função dos fluxos médios. Para isso, é feita a seguinte aproximação:

$$J_g(x_{i+1}) = -D_g^m \left. \frac{d\phi_g(x)}{dx} \right|_{x_{i+1}} \cong -D_g^m \frac{\phi_g(x_{i+1}) - \bar{\phi}_g^i}{\Delta x_i/2} \quad (3.10)$$

$$J_g(x_i) = -D_g^m \left. \frac{d\phi_g(x)}{dx} \right|_{x_i} \cong -D_g^m \frac{\bar{\phi}_g^i - \phi_g(x_i)}{\frac{\Delta x_i}{2}}. \quad (3.11)$$

Considerando que o coeficiente de difusão é também uniforme na região m , portanto D_g^m . Impondo a continuidade de corrente $J_g(x_i^+) = J_g(x_i^-)$ é possível obter o fluxo nas diferentes regiões da malha. Considerando o fluxo numa malha inicial qualquer $i_{inicial,m}$, exceto na região 1 ($m > 1$, figura 2), ele será:

$$\phi_g(x_i) = \frac{D_g^m \Delta x_{m-1}}{D_g^{m-1} \Delta x_m + D_g^m \Delta x_{m-1}} \bar{\Phi}_g^i + \frac{D_g^{m-1} \Delta x_m}{D_g^{m-1} \Delta x_m + D_g^m \Delta x_{m-1}} \bar{\Phi}_g^{i-1}. \quad (3.12)$$

Para o caso em que o ponto x_{i+1} se encontra na malha final, qualquer que seja a região exceto M ($m < M$), o fluxo será:

$$\phi_g(x_{i+1}) = \frac{D_g^{m+1} \Delta x_m}{D_g^m \Delta x_{m+1} + D_g^{m+1} \Delta x_m} \bar{\Phi}_g^{i+1} + \frac{D_g^m \Delta x_{m+1}}{D_g^m \Delta x_{m+1} + D_g^{m+1} \Delta x_m} \bar{\Phi}_g^i. \quad (3.13)$$

Finalmente, para o caso em que os pontos x_i e x_{i+1} estiverem na mesma região, ou seja, $i_{inicial,m} < i < i_{final,m}$, o fluxo será:

$$\phi_g(x_i) = \frac{1}{2} (\bar{\Phi}_g^i + \bar{\Phi}_g^{i+1}) \quad (3.14)$$

$$\text{e } \phi_g(x_{i+1}) = \frac{1}{2} (\bar{\Phi}_g^{i+1} + \bar{\Phi}_g^i). \quad (3.15)$$

Substituindo estes valores em (3.10) e (3.11), chega-se a:

- Para $i_{inicial,m}$ e $m > 1$

$$J_g(x_{i+1}) \cong -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} (\bar{\Phi}_g^{i+1} - \bar{\Phi}_g^i) \quad (3.16)$$

$$J_g(x_i) \cong \frac{2D_g^m D_g^{m-1}}{D_g^{m-1} \Delta x_m + D_g^m \Delta x_{m-1}} (\bar{\Phi}_g^i - \bar{\Phi}_g^{i-1}). \quad (3.17)$$

- Para $i_{final,m}$ e $m < M$

$$J_g(x_{i+1}) \cong \frac{2D_g^m D_g^{m+1}}{D_g^m \Delta x_{m+1} + D_g^{m+1} \Delta x_m} (\bar{\Phi}_g^{i+1} - \bar{\Phi}_g^i) \quad (3.18)$$

$$J_g(x_i) \cong -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} (\bar{\Phi}_g^i - \bar{\Phi}_g^{i-1}). \quad (3.19)$$

- Para $i_{inicial,m} < i < i_{final,m}$

$$J_g(x_{i+1}) \cong -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} (\bar{\Phi}_g^{i+1} - \bar{\Phi}_g^i) \quad (3.20)$$

$$J_g(x_i) \cong -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} (\bar{\Phi}_g^i - \bar{\Phi}_g^{i-1}) . \quad (3.21)$$

Então, feitas substituições, chegamos na equação de diferenças:

$$a_1^i \bar{\Phi}_1^{i-1} + b_1^i \bar{\Phi}_1^i + c_1^i \bar{\Phi}_1^{i+1} = \frac{1}{k_{eff}} (d_1^i \bar{\Phi}_1^i + d_2^i \bar{\Phi}_2^i) , 1 < i < M \quad (3.22)$$

$$a_2^i \bar{\Phi}_2^{i-1} + b_2^i \bar{\Phi}_2^i + c_2^i \bar{\Phi}_2^{i+1} = e_2^i \bar{\Phi}_1^i , 1 < i < M$$

onde os coeficientes são:

- Para $i_{inicial,m}$ e $m > 1$

$$a_g^i = \frac{-2D_g^{m-1}D_g^m}{D_g^{m-1}\Delta x_m + D_g^m\Delta x_{m-1}} \quad (3.23)$$

$$b_g^i = -(a_g^i + c_g^i) + \zeta \Delta x_m \quad (3.24)$$

$$c_g^i = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} \quad (3.25)$$

$$d_g^i = \nu \Sigma_{fg}^m \Delta x_m, \quad e_2^i = \Sigma_{s12}^m \Delta x_m \quad (3.26)$$

onde $\zeta = \Sigma_{Rg}^m$ para $g = 1$ e $\zeta = \Sigma_{a2}$ para $g = 2$.

- Para $i_{final,m}$ e $m > 1$

$$a_g^i = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} \quad (3.27)$$

$$b_g^i = -(a_g^i + c_g^i) + \zeta \Delta x_m \quad (3.28)$$

$$c_g^i = \frac{-2D_g^{m-1}D_g^m}{D_g^{m-1}\Delta x_m + D_g^m\Delta x_{m-1}} \quad (3.29)$$

$$d_g^i = v \Sigma_{fg}^m \Delta x_m, \quad e_2^i = \Sigma_{s12}^m \Delta x_m \quad (3.30)$$

onde $\zeta = \Sigma_{Rg}^m$ para $g = 1$ e $\zeta = \Sigma_{a2}$ para $g = 2$

- Para $i_{inicial,m} < i < i_{final,m}$

$$a_g^i = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} \quad (3.31)$$

$$b_g^i = -(a_g^i + c_g^i) + \zeta \Delta x_m \quad (3.32)$$

$$c_g^i = -\frac{D_g^m}{\Delta x_m} \quad (3.33)$$

$$d_g^i = v \Sigma_{fg}^m \Delta x_m, \quad e_2^i = \Sigma_{s12}^m \Delta x_m \quad (3.34)$$

onde $\zeta = \Sigma_{Rg}^m$ para $g = 1$ e $\zeta = \Sigma_{a2}$ para $g = 2$

Agora, é necessário determinar as equações de diferenças, para os casos de malha nas extremidades, ou seja, $i=1$ e $i=M$. Para isso, precisa se escrever com $i=1$:

$$\begin{aligned} [J_1(x_2) - J_1(x_1)] + \Sigma_{R1}^1 \overline{\Phi}_g^1 \Delta x_1 &= \frac{1}{k_{eff}} [v \Sigma_{f1}^1(x) \overline{\Phi}_1^1(x) + v \Sigma_{f2}^1(x) \overline{\Phi}_2^1(x)] \Delta x_1 \\ [J_2(x_2) - J_2(x_1)] + \Sigma_{a2}^1 \Delta x_1 \overline{\Phi}_2^1(x) &= \Sigma_{s12}^1(x) \overline{\Phi}_1^1(x) \Delta x_1 \end{aligned} \quad (3.35)$$

que também podem gerar as seguintes equações para os diferentes valores de i :

para $i=1$

$$[J_1(x_2) - J_1(x_1)] + \Sigma_{Rg}^1 \overline{\Phi}_g^1 \Delta x_1 = \frac{1}{k_{eff}} [v \Sigma_{f1}^1(x) \overline{\Phi}_1^1(x) + v \Sigma_{f2}^1(x) \overline{\Phi}_2^1(x)] \Delta x_1$$

$$[J_2(x_2) - J_2(x_1)] + \Sigma_{a2}^1 \Delta x_1 \overline{\Phi}_2^1(x) = \Sigma_{s12}^1(x) \overline{\Phi}_1^1(x) \Delta x_1,$$

para $i=2$

$$[J_1(x_3) - J_1(x_2)] + \Sigma_{Rg}^2 \overline{\Phi}_g^2 \Delta x_2 = \frac{1}{k_{eff}} [\nu \Sigma_{f1}^2(x) \overline{\Phi}_1^2(x) + \nu \Sigma_{f2}^2(x) \overline{\Phi}_2^2(x)] \Delta x_2$$

$$[J_2(x_3) - J_2(x_2)] + \Sigma_{a2}^2 \Delta x_2 \overline{\Phi}_2^2(x) = \Sigma_{s12}^1(x) \overline{\Phi}_1^2(x) \Delta x_2,$$

para $i=M-1$

$$\begin{aligned} [J_1(x_M) - J_1(x_{M-1})] + \Sigma_{Rg}^{M-1} \overline{\Phi}_g^{M-1} \Delta x_{M-1} \\ = \frac{1}{k_{eff}} [\nu \Sigma_{f1}^1(x) \overline{\Phi}_1^{M-1}(x) + \nu \Sigma_{f2}^1(x) \overline{\Phi}_2^{M-1}(x)] \Delta x_{M-1} \end{aligned}$$

$$[J_2(x_M) - J_2(x_{M-1})] + \Sigma_{a2}^{M-1} \Delta x_{M-1} \overline{\Phi}_2^{M-1}(x) = \Sigma_{s12}^1(x) \overline{\Phi}_1^{M-1}(x) \Delta x_{M-1}.$$

Ainda para $i=1$, para que o valor de $J_g(x_2)$ seja determinado, é necessário substituir o valor $i=1$ na equação (3.16)

$$J_g(x_2) \cong -\frac{D_g^1}{\Delta x_1} (\overline{\Phi}_g^2 - \overline{\Phi}_g^1). \quad (3.36)$$

Com o mesmo procedimento usado na equação (3.11), calcula-se:

$$J_g(x_1) = -D_g^1 \left. \frac{d\phi_g(x)}{dx} \right|_{x_i} \cong -2D_g^1 \frac{\overline{\Phi}_g^1 - \phi_g(x_1)}{\Delta x_1} \quad (3.37)$$

Das condições de contorno:

$$\alpha \phi_g(x_1) + \beta \frac{d\phi_g(x_1)}{dx} = 0 \quad (3.38)$$

$$\frac{d\phi_g(x_1)}{dx} = -\frac{\alpha}{\beta} \phi_g(x_1) \quad (3.39)$$

chega-se a uma equação para p fluxo na malha $i=1$ e grupo g :

$$\phi_g(x_1) = \frac{1}{1 - \frac{\alpha \Delta x_1}{2\beta}} \overline{\Phi}_g^1. \quad (3.40)$$

Substituindo em (3.37), obtém-se uma equação para $J_g(x_1)$:

$$J_g(x_1) = \left(\frac{2\alpha D_g^1}{2\beta - \alpha \Delta x_1} \right) \overline{\Phi}_g^1. \quad (3.41)$$

Com isso, é possível chegar a uma equação de diferenças específica para o caso $i=1$ se inserir para $i=1$:

$$\phi(x_0) \equiv \phi_0 = \frac{\bar{\phi}_1}{1 - \frac{2\alpha}{\beta\Delta x_1}}. \quad (3.42)$$

Aplicando (3.42) em (3.40), tem-se:

$$J(x_0) = J_0 = D_1 \left(\frac{\alpha}{\beta} \right) \frac{\bar{\phi}_1}{1 - \frac{2\alpha}{\beta\Delta x_1}}. \quad (3.43)$$

Analisando (3.42) para $i=1$ e considerando (3.43), chega-se a:

$$\begin{aligned} b_1^1 \bar{\phi}_1^1 + c_1^1 \bar{\phi}_1^1 &= \frac{1}{k_{eff}} (d_1^1 \bar{\phi}_1^1 + d_2^1 \bar{\phi}_2^1), \\ b_2^1 \bar{\phi}_2^1 + c_2^1 \bar{\phi}_2^1 &= e_2^1 \bar{\phi}_1^1 \end{aligned} \quad (3.44)$$

onde

$$b_g^i = \zeta \Delta x_1 - \frac{2\alpha D_g^1}{(2\beta - \alpha\Delta x_1)} + \frac{D_g^1}{\Delta x_1}, \quad (3.45)$$

$$c_1 = -\frac{D_g^1}{\Delta x_1} \quad (3.46)$$

$$d_g^1 = \nu \Sigma_{fg}^1 \Delta x_1, \quad e_2^1 = \Sigma_{s12}^1 \Delta x_1 \quad (3.47)$$

onde $\zeta = \Sigma_{Rg}^1$ para $g = 1$ e $\zeta = \Sigma_{ag}^1$ para $g = 2$.

Analogamente, é preciso que seja, também, determinada uma equação de diferenças para o caso $i=M$.

$$\begin{aligned} a_1^M \bar{\phi}_1^{M-1} + b_1^M \bar{\phi}_1^M &= \frac{1}{k_{eff}} (d_1^M \bar{\phi}_1^M + d_2^M \bar{\phi}_2^M), \\ a_2^M \bar{\phi}_2^{M-1} + b_2^M \bar{\phi}_2^M &= e_2^M \bar{\phi}_1^M \end{aligned} \quad (3.48)$$

onde

$$a_g^M = -\frac{D_g^M}{\Delta x_M} \quad (3.49)$$

$$b_g^M = \zeta \Delta x_M - \frac{2\alpha D_g^M}{(2\beta_g - \alpha \Delta x_M)} + \frac{D_g^M}{\Delta x_M} \quad (3.50)$$

$$d_g^M = \nu \Sigma_{fg}^M \Delta x_M, \quad e_2^M = \Sigma_{s12}^M \Delta x_M \quad (3.51)$$

onde $\zeta = \Sigma_{Rg}^M$ para $g = 1$ e $\zeta = \Sigma_{ag}^M$ para $g = 2$.

O conjunto das equações de diferenças (3.22), (3.44) e (3.48), pode ser representado pela seguinte forma matricial:

$$\underline{\Psi}_1 = \begin{bmatrix} \bar{\Phi}^1 \\ \bar{\Phi}^2 \\ \bar{\Phi}^3 \\ \bar{\Phi}^4 \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{\Phi}^{M-1} \\ \bar{\Phi}^M \end{bmatrix} \quad \underline{\Psi}_2 = \begin{bmatrix} \bar{\Phi}^1 \\ \bar{\Phi}^2 \\ \bar{\Phi}^3 \\ \bar{\Phi}^4 \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{\Phi}^{M-1} \\ \bar{\Phi}^M \end{bmatrix}. \quad (3.52)$$

onde os fluxos nos pontos de malha são organizados sequencialmente em relação aos grupos de energia. Definindo as matrizes quadradas de ordem J:

$$Y_g = \begin{bmatrix} b_g^1 & c_g^1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ a_g^1 & \ddots & \ddots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & & \ddots & \ddots & c_g^M \\ 0 & \dots & \dots & & a_g^M & b_g^M \end{bmatrix} \quad (3.53)$$

$$Q = \begin{vmatrix} e_2^1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & & 0 & e_2^M \end{vmatrix}$$

que representa a matriz da seção de choque de espalhamento. Ainda se faz necessário definir as matrizes F , para cada grupo:

$$F_{1g'} = \begin{vmatrix} d_{g'}^1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & & 0 & d_{g'}^M \end{vmatrix}. \quad (3.54)$$

Podemos escrever:

$$\begin{vmatrix} Y_1 & 0 \\ -Q & Y_2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \bar{\Phi}_1 \\ \bar{\Phi}_2 \end{vmatrix} = \frac{1}{K_{eff}} \begin{vmatrix} F_{11} & F_{12} \\ 0 & 0 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \bar{\Phi}_1 \\ \bar{\Phi}_2 \end{vmatrix}. \quad (3.55)$$

Dessa forma, é possível representar a equação da continuidade de nêutrons discretizada, para o caso centrado na malha e para um determinado grupo de energia g , além de representar o problema de forma matricial com o problema de determinar o maior autovalor k_{eff} e o seu autovetor associado $\underline{\Psi}$:

$$Y\underline{\Psi} = \frac{1}{k_{eff}} F\underline{\Psi}. \quad (3.56)$$

O vetor do tipo coluna $\underline{\phi}$ representa o fluxo de nêutrons. Para que seja obtido o valor do vetor coluna $\underline{\Psi}$, é necessária a inversão da matriz Y , sendo reescrita da seguinte forma:

$$\underline{\Psi} = \frac{1}{k_{eff}} (Y^{-1}F)\underline{\Psi}. \quad (3.57)$$

Portanto, o maior autovalor e o seu autovetor serão obtidos após i iterações externas, em um processo realizado pelo algoritmo denominado de método das potências.

$$\underline{\Psi}^{(i+1)} = \frac{1}{k_{eff}^{(i+1)}} (Y^{-1}F)\underline{\Psi}^{(i)}. \quad (3.58)$$

3.3 O método das Potências

A partir do que foi explicitado no tópico anterior, fica claro que o esquema centrado na malha conduz a um problema matricial, que é o de determinar o maior autovalor k_{eff} e o autovetor a ele associado $\underline{\Psi}$. Portanto, para que a obtenção desta resolução seja possível, é necessário abordar um método adequado. Para este trabalho, foi eleito como método ideal o método das Potências. Abaixo, será feita uma breve abordagem sobre o método das potências e suas aplicações (ALVIM, 2007).

Como visto anteriormente, da discretização das equações estacionárias, chega-se a um problema do tipo:

$$\underline{\Psi}^{(i+1)} = \frac{1}{k_{eff}^{(i+1)}} (Y^{-1}F)\underline{\Psi}^{(i)}$$

que pode-se realizar a seguinte simplificação:

$$A\underline{\Psi} = \frac{1}{K_{eff}} \underline{\Psi} . \quad (3.59)$$

Supondo que A, que é equivalente a Y/F em (3.58), possua inversa, cabe escrever:

$$K_{eff} \underline{\Psi} = A^{-1} \underline{\Psi} . \quad (3.60)$$

Com isso, o método das potências é aplicado ao problema de autovalor acima, substituindo A por A^{-1} , para obter o maior autovalor K_{eff} e seu autovetor associado através do método inverso das potências, que é dado por:

$$\underline{\Psi}^{(i+1)} = A^{-1} \left(\frac{\underline{\phi}^{(i)}}{k_{eff}^{(i)}} \right) = A^{-1} \underline{\Psi}_{Norm}^i \quad (3.61)$$

$$k_{eff}^{(i+1)} = k_{eff}^{(i)} \frac{(\underline{\omega}^T, \underline{\Psi}^{(i+1)})}{(\underline{\omega}^T, \underline{\Psi}_{Norm}^i)} \quad (3.62)$$

ou

$$\underline{\Psi}^{(i+1)} = \frac{1}{k_{eff}^{(i)}} A^{-1} \underline{\Psi}^{(i)} \quad (3.63)$$

$$k_{eff}^{(i+1)} = k_{eff}^{(i)} \frac{(\underline{\omega}^T, \underline{\Psi}^{(i+1)})}{(\underline{\omega}^T, \underline{\Psi}^{(i)})} , \quad (3.64)$$

onde $\underline{\omega}$ é um vetor coluna adequadamente escolhido, que tenderá a $\frac{1}{K_{eff}}$ e $\underline{\Psi}_{Norm}^i$ é uma normalização feita do fluxo, de acordo a equação anterior

$$\underline{\Psi}^{(i+1)} = A^{-1} \left(\frac{\underline{\Psi}^{(i)}}{k_{eff}^{(i)}} \right) = A^{-1} \underline{\Psi}_{Norm}^i \quad (3.65)$$

Para evitar que se $|1/K_{eff}| > 1$, os valores de $\underline{\Psi}^{(i)}$ cresçam rapidamente, à medida que eles forem iterando.

Portanto, a iteração dada por (3.61-3.62) ou por (3.63-3.64) determina o maior autovalor de (3.59) e o autovetor associado a este maior autovalor.

Em geral, a equação matricial é resolvida iterativamente, ou seja, para um determinado valor i (que indica o número de iterações externas), o segundo termo é um termo de fonte conhecido (ALVIM, 2007),

$$\frac{1}{k_{eff}^{(i)}} \underline{\Psi}^{(i)} = \underline{b}. \quad (3.66)$$

resolvendo, então,

$$A \underline{\Psi}^{(i+1)} = \underline{b} \quad (3.67)$$

por um processo iterativo. É importante salientar que para um dado i podem ser necessárias muitas iterações internas para determinar $\underline{\Psi}^{(i+1)}$.

Uma vez que o valor de $\underline{\Psi}^{(i+1)}$ é obtido, torna-se possível o cálculo de $k_{eff}^{(i+1)}$ para então repetir todo o processo para $i = i+1$. Todo esse processo precisa ser passado para alguma linguagem computacional, pois muitos desses cálculos podem ser muito extensos e impraticáveis de serem resolvidos analiticamente.

Conforme descrito no início do presente trabalho, o objetivo é realizar todas essas iterações através de um código desenvolvido para a linguagem Fortran. Entretanto, nada impede que esse mesmo método iterativo possa ser desenvolvido para algum outro tipo de linguagem.

A iteração é feita de acordo figura a seguir, definindo que, para um passo de integração seja bem-sucedido, precisa-se que o valor do erro de truncamento escalado máximo seja menor que uma tolerância especificada pelo usuário \mathcal{E} .:

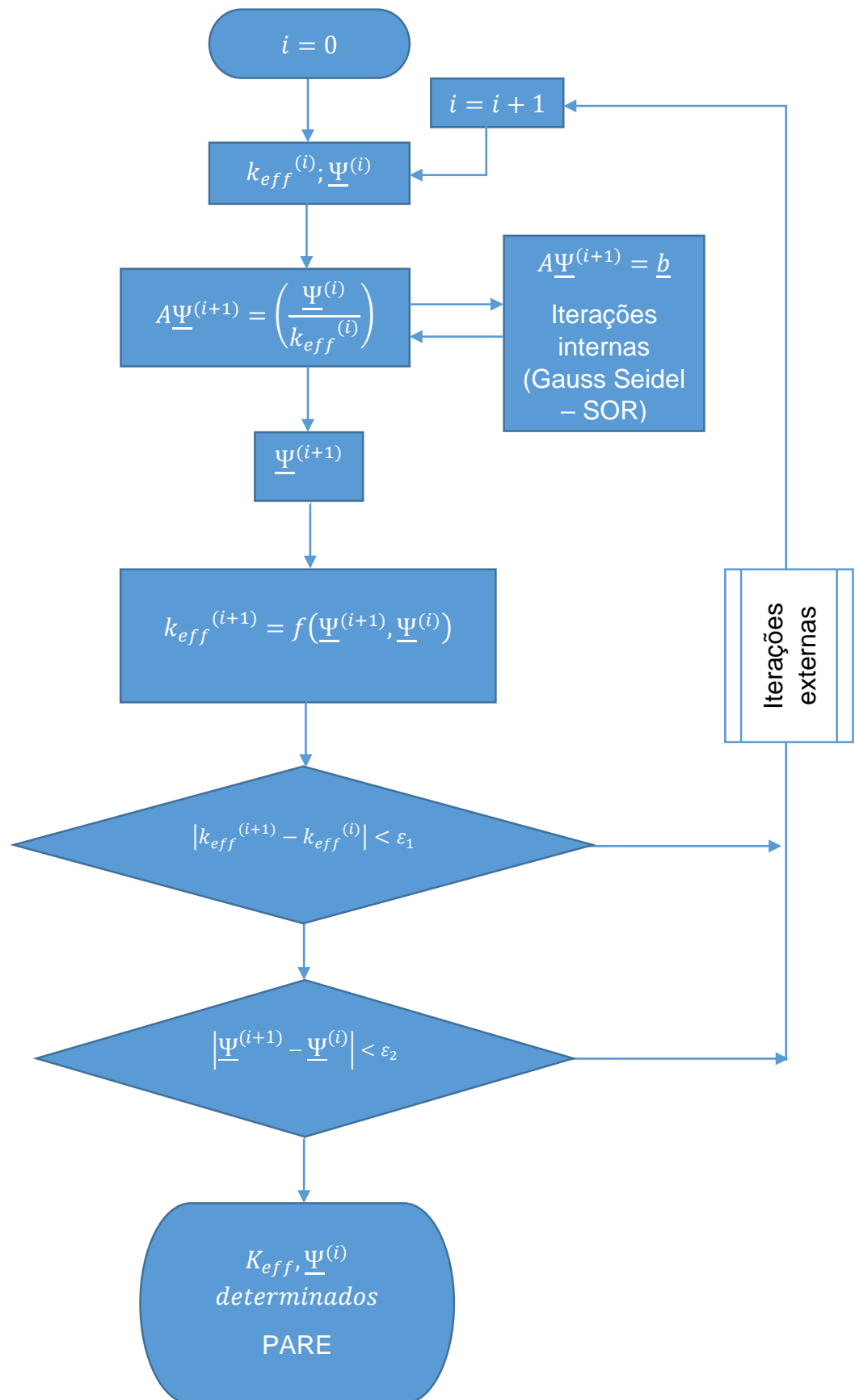


Figura 9 - Fluxograma de Iterações por método de potência

3.4 O problema de Fonte Fixa

Após realizar o processo de discretização para o caso estacionário, é necessário que seja incluído, na equação (3.5), um termo que represente uma fonte externa de nêutrons, conhecido como problema de fonte fixa.

3.4.1 Equação da continuidade de nêutrons

Define-se como ponto de partida o que foi apresentado na seção anterior, apresentando então a equação da continuidade de nêutrons com fonte externa, para uma dimensão e dois grupos de energia.

É conveniente salientar que, para este caso específico, não existe o fator de multiplicação. Sendo assim, tem-se como incógnita o termo $\varphi_g(x)$, ou seja, o fluxo de nêutrons dependentes de um ponto x do reator, em um determinado grupo de energia g . A fonte externa S é conhecida e ajustada de forma a resultar um fluxo de nêutrons esperado. Então, chega-se à seguinte equação:

$$\frac{d}{dx}J_g(x) + \Sigma_{Rg}(x)\varphi_g(x) = S_g(x) + \chi_g \sum_{g'=1}^2 v\Sigma_{fg'}(x)\phi_{g'}(x) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \Sigma_{sgg'}(x)\phi_{g'}(x). \quad (3.68)$$

A discretização da equação (3.68) é feita de forma idêntica à realizada na seção anterior, ou seja, método de diferenças finitas centrado na malha.

3.4.2 Discretização da equação com o termo de fonte

Por estar sendo utilizado o mesmo método para a discretização da equação da seção anterior e ser apenas alterada adicionando um termo e retirando o fator de multiplicação, é de se esperar que sejam obtidos os mesmos resultados obtidos da seção 3.2.

Portanto, resta efetivamente que seja realizada apenas a discretização para o fator associado à fonte externa, que também seguirá o método de diferenças finitas centrada na malha, da seguinte forma:

$$\bar{S}_g^n = \frac{\int_{x_n}^{x_{n+1}} S_g(x) dx}{\Delta x_m} \quad (3.69)$$

onde $\Delta x_m = x_{n+1} - x_n$; para $x_{\text{início},m} \leq x \leq x_{\text{fim},m}$.

Então, a equação (3.22) pode ser escrita da seguinte forma, incluindo apenas o termo fonte:

$$a_g^N \bar{\varphi}_g^{N-1} + (b_g^N - d_g^N) \bar{\varphi}_g^N + c_g^N \bar{\varphi}_g^{N+1} = \bar{S}_g^N. \quad (3.70)$$

A partir daí, é conveniente que essas equações sejam representadas matricialmente, da mesma forma da seção (3.2), levando a uma representação semelhante à encontrada em (3.57):

$$\begin{aligned} Y\underline{\Psi} - F\underline{\Psi} &= \underline{S} \\ (Y - F)\underline{\Psi} &= \underline{S}, \end{aligned} \quad (3.71)$$

onde $\underline{\Psi}$, Y e F representam as mesmas matrizes encontradas anteriormente e a variável \underline{S}_g é o vetor coluna correspondente à fonte externa, e é representada matricialmente da seguinte maneira:

$$\underline{S}_1 = \begin{bmatrix} \bar{S}^1 \\ \bar{S}^2 \\ \bar{S}^3 \\ \bar{S}^4 \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{S}^{N-1} \\ \bar{S}^N \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \underline{S}_2 = \begin{bmatrix} \bar{S}^1 \\ \bar{S}^2 \\ \bar{S}^3 \\ \bar{S}^4 \\ \vdots \\ \vdots \\ \bar{S}^{N-1} \\ \bar{S}^N \end{bmatrix}. \quad (3.72)$$

Estes valores de fonte externa obtidos na parte estacionária, serão considerados também para o código de cinética espacial, que será tratado no próximo capítulo.

4 DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL

4.1 Introdução

A partir do método de discretização trabalhado no capítulo 3, é possível realizar para um modelo simplificado e estacionário a discretização da equação de difusão de nêutrons para dois grupos de forma mais completa, ou seja, incluindo a equação de seis grupos de precursores e tratando da parte temporal.

Para isso, faz-se necessário abordar a integração da equação da concentração de precursores de nêutrons retardados para então ser realizada a discretização na parte espacial pelo método de diferenças finitas e pelo método de Runge-Kutta generalizado de Rosembrock (DE LIMA, 2005) na parte temporal. Feita a discretização, as equações serão transformadas em matrizes para que possam ser calculadas numericamente através de códigos em FORTRAN.

Após apresentar as equações da cinética, será novamente necessário realizar a discretização da equação, tanto para os termos espaciais, quanto para os termos temporais. Esses processos foram divididos em duas seções, explicitadas a seguir.

4.2 Discretização espacial

O procedimento de discretização das equações da cinética em relação ao espaço são muito similares ao procedimento realizado para o caso estacionário (problema de autovalor). Assim, aplicando o mesmo desenvolvimento adotado no capítulo 3 nas equações da cinética espacial, equações (2.7) e (2.8), é possível escrever a seguinte equação:

$$\begin{aligned}
& -B_{n,e}(t)\phi_g^{i-1,j,k}(t) - B_{n,n}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) \\
& -B_{n,d}(t)\phi_g^{i+1}(t) - \Sigma_{Rg}^i(t)\phi_g^i(t) \\
& + \frac{1}{\nu_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g^i(t) = (1-\beta)F^i(t)\phi_g^i(t) + S^i(t)\phi_g^i(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l^i(t),
\end{aligned}$$

(4.1)

onde:

$$[F^i(t)] \equiv \begin{bmatrix} \chi_1 \nu \Sigma_{f1}^i(t) & \chi_1 \nu \Sigma_{f2}^i(t) \\ \chi_2 \nu \Sigma_{f1}^i(t) & \chi_2 \nu \Sigma_{f2}^i(t) \end{bmatrix},$$

$$[S^i(t)] \equiv \begin{bmatrix} 0 & \Sigma_{12}^i(t) \\ \Sigma_{21}^i(t) & 0 \end{bmatrix},$$

$$[B_{n,m}(t)] \equiv \begin{bmatrix} b_{n,m}^1(t) & 0 \\ 0 & b_{n,m}^2(t) \end{bmatrix},$$

$$[B_{n,n}(t)] \equiv \begin{bmatrix} b_{n,n}^1(t) & 0 \\ 0 & b_{n,n}^2(t) \end{bmatrix},$$

com

$$b_{n,n}^g(t) = -\left(2 \frac{D_g^m(t)}{\Delta x_m}\right) + \Sigma_{Rg}^m(t) \Delta x_m$$

e n representando a divisão de malha i e m sendo o seu vizinho da esquerda ou da direita, na direção x.

4.2.1 Equação semi-discretizada

Para melhor compreensão, coloca-se a equação (4.1) em uma estrutura bloco tridiagonal, da qual chega-se à equação da cinética espacial semi-discretizada na formulação do método de diferenças finitas:

$$[v]^{-1} \frac{d}{dt} \Phi(t) + [B(t)] \Phi(t) = [S(t)] \Phi(t) + (1 - \beta) [F(t)] \Phi(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l c_{\sim l}(t) \quad (4.2)$$

$$\frac{d}{dt} c_{\sim l}(t) = \beta_l [F(t)] \Phi(t) - \lambda_l c_{\sim l}(t), \quad l = 1, \dots, L, \quad (4.3)$$

onde

$$\Phi(t) \equiv \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \vdots \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix}, \quad \phi_{\sim g}(t) \equiv \begin{pmatrix} \phi_g^1(t) \\ \vdots \\ \phi_g^n(t) \\ \vdots \\ \phi_g^N(t) \end{pmatrix},$$

$$c_{\sim l}(t) \equiv \begin{pmatrix} \chi_{1,l}^r C_{\sim l}(t) \\ \vdots \\ \chi_{2,l}^r C_{\sim l}(t) \end{pmatrix}, \quad c_{\sim l}(t) \equiv \begin{pmatrix} \chi_{1,l}^r C_l^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{1,l}^r C_l^N(t) \\ \vdots \\ \chi_{2,l}^r C_l^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{2,l}^r C_l^N(t) \end{pmatrix},$$

$$[v]^{-1} = \begin{bmatrix} 1/\nu_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1/\nu_1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1/\nu_2 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1/\nu_2 \end{bmatrix}_{2N \times 2N},$$

$$[B(t)] \equiv \begin{bmatrix} [B_1(t)] & 0 \\ 0 & [B_2(t)] \end{bmatrix},$$

$$[B_g(t)] \equiv \begin{pmatrix} b_{1,1}^g & b_{1,2}^g & & & & & & & & & \\ b_{2,1}^g & b_{2,2}^g & b_{2,3}^g & & & & & & & & \\ & b_{3,2}^g & b_{3,3}^g & \ddots & & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & b_{n-1,n}^g & & & & & & \\ & & & \ddots & b_{n,n}^g & \ddots & & & & & \\ & & & & b_{n+1,n}^g & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & & \ddots & b_{N-2,N-2}^g & b_{N-2,N-1}^g & & & \\ & & & & & & b_{N-1,N-2}^g & b_{N-1,N-1}^g & b_{N-1,N}^g & & \\ & & & & & & & b_{N,N-1}^g & b_{N,N}^g & & \end{pmatrix}$$

onde n representa o número total de divisões da malha. As matrizes de fissão e espalhamento são representadas da seguinte forma, respectivamente:

$$[F(t)] \equiv \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ [F_{21}(t)] & [F_{22}(t)] \end{bmatrix}$$

$$[S(t)] \equiv \begin{bmatrix} 0 & [S_1(t)] \\ [S_2(t)] & 0 \end{bmatrix}$$

que são formadas pelos blocos diagonais de dimensões NXN:

$$[S_g(t)] = \begin{bmatrix} \sum_{gg'}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{gg'}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sum_{gg'}^N(t) \end{bmatrix}, \quad g \neq g', \quad g=1,2, \quad g'=1,2,$$

$$[F_{gg}(t)] = \chi_g \begin{bmatrix} \nu \sum_{fg}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu \sum_{fg}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu \sum_{fg}^N(t) \end{bmatrix}, \quad g=1,2$$

$$[F_{gg'}(t)] = \chi_g \begin{bmatrix} \nu \Sigma_{fg'}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu \Sigma_{fg'}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu \Sigma_{fg'}^N(t) \end{bmatrix}, \quad g=1, 2, \quad g'=1, 2.$$

Como o método de diferenças finitas forma um sistema bloco-tridiagonal, pode-se adotar o método SOR para as iterações internas e o método de Potências (SUTTON e AVILES, 1996; FORTUNA, 2000) para as iterações externas.

Observa-se que as equações. (4.2) e (4.3) representam um problema de valor inicial, onde $\phi_{\sim g}(0)$ e $C_{\sim l}(0)$ são conhecidos, obtidos do cálculo estacionário.

Se considerarmos que $\chi_1=1.0$, $\chi_2=0.0$, $\chi_{1,l}=1.0$, $\chi_{2,l}=0.0$ e que não há "upscattering", as matrizes $[F(t)]$ e $[S(t)]$ serão dadas por:

$$[F(t)] = \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$[S(t)] = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ [S_{21}(t)] & 0 \end{bmatrix},$$

E as equações (4.2) e (4.3) ficam

$$[v]^{-1} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} = - \begin{bmatrix} [B_1(t)] - (1-\beta)[F_{11}(t)] & -(1-\beta)[F_{12}(t)] \\ -[S_{21}(t)] & [B_2(t)] \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} + \sum_{l=1}^L \lambda_l \begin{pmatrix} C_{\sim l}(t) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

$$\frac{d}{dt} C_{\sim l}(t) = \beta_l \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi(t) \\ \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} - \lambda_l C_{\sim l}(t). \quad (4.5)$$

4.3 Discretização Temporal das Equações da Cinética Espacial

Finalizada a discretização da parte espacial, será necessária a realização de procedimentos similares aos realizados nos tópicos anteriores para a parte temporal.

O processo de resolução das equações diferenciais dependentes do tempo será realizado duas vezes. Na primeira vez, utiliza-se o passo fixo no tempo, tratando a equação de nêutrons através do método de Euler implícito (STACEY, 1970; NAKAMURA, 1977) e integrando analiticamente a equação de concentração de precursores (GINESTAR, VERDÚ, *et al.*, 1998; STACEY, 1970). Na segunda vez, discretizam-se novamente as equações, desta vez desenvolvendo um código que controle o passo no tempo. Para desenvolver o método de controle de passo no tempo, o método de Runge-Kutta generalizado de Rosenbrock será utilizado.

4.3.1 Integração Analítica da Concentração dos Precursores

A integração analítica da equação da concentração dos precursores é realizada, pois com este procedimento é possível reduzir a dimensão do sistema de equações da cinética espacial (equação de difusão de nêutrons mais a equação dos precursores) e, conseqüentemente, a rigidez do sistema.

A equação dos precursores é analiticamente integrada considerando que a seção de choque de fissão varia linearmente no tempo (STACEY, 1970). Pelo fato das equações possuírem no termo do fluxo de nêutrons e da constante de decaimento no termo da concentração de precursores o termo do inverso da velocidade, as equações da cinética espacial formam um sistema de equações rígido.

Valores típicos de $(1/\nu_g)$ são da ordem de 10^{-7} , enquanto que os menores valores para λ_l são da ordem de 10^{-2} , caracterizando, assim, escalas diferentes de tempo em um mesmo problema.

A aplicação do esquema de integração analítica da equação dos precursores nos métodos da cinética espacial tem como objetivo reduzir a dimensão do sistema de equações pertinentes e, conseqüentemente, reduzir a rigidez do sistema.

Para integrar analiticamente a equação da concentração dos precursores, assume-se que a fonte de fissão, dada pelo termo $\sum_{g=1}^2 [F_{1g}(t)] \phi(t)$, varia linearmente no tempo dentro de cada intervalo de tempo, $[t_\tau, t_{\tau+1}]$, discretizado.

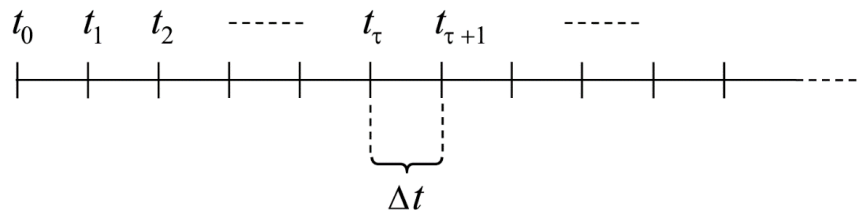


Figura 10 - Esquema de discretização no tempo

Feita esta aproximação, a equação (4.5) fica na seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} C_{\sim l}(t) = -\lambda_l C_{\sim l}(t) + \beta_l \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{\tau} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{\tau} +$$

$$\frac{\beta_l}{\Delta t} (t - t_\tau) \left\{ \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{\tau+1} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{\tau+1} - \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{\tau} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{\tau} \right\}.$$

(4.6)

Após isso, integra-se analiticamente a equação (4.6) em um intervalo de tempo $[t_\tau, t_{\tau+1}]$ para que seja obtida uma expressão para definida em $[t_{\tau+1}]$:

$$\begin{aligned}
C_{\sim l}^{(\tau+1)} = C_{\sim l}^{(\tau)} e^{-\lambda_l \Delta t} + \beta_l \left\{ a_l \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{(\tau+1)} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau+1)} + \right. \\
\left. b_l \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{(\tau)} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau)} \right\}
\end{aligned}
\tag{4.7}$$

onde os coeficientes são definidos por:

$$a_l = \frac{(1 + \lambda_l \Delta t)(1 - e^{-\lambda_l \Delta t})}{\lambda_l^2 \Delta t} - \frac{1}{\lambda_l}$$

$$b_l = \frac{\lambda_l \Delta t - 1 + e^{-\lambda_l \Delta t}}{\lambda_l^2 \Delta t}$$

Finalizada essa integração, o resultado será adicionado na equação de nêutrons discretizada no tempo, que será trabalhada na próxima seção.

4.3.2 Discretização Temporal através do método de Euler Implícito

O Método de Euler implícito aplicado à equação matricial Eq. (4.4) conduz à seguinte expressão:

$$\begin{aligned}
[\nu]^{-1} \left(\frac{\Phi^{(\tau+1)} - \Phi^{(\tau)}}{\Delta t} \right) = \\
- [B]^{(\tau+1)} \Phi^{(\tau+1)} + (1 - \beta) [F]^{(\tau+1)} \Phi^{(\tau+1)} + [S]^{(\tau+1)} \Phi^{(\tau+1)} + \sum_{l=1}^6 \lambda_l \zeta_l^{(\tau+1)}.
\end{aligned}$$

Sendo:

$$\Phi_{\sim} \equiv \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1} \\ \phi_{\sim 2} \end{pmatrix}, \quad c_{\sim} \equiv \begin{pmatrix} C_{\sim l} \\ 0_{\sim} \end{pmatrix} \quad \text{e}$$

$$[A] \equiv \begin{bmatrix} \nu_1(-[B_1] + (1-\beta)[F_{11}]) & \nu_1(1-\beta)[F_{12}] \\ \nu_2[S_{21}] & -\nu_2[B_2] \end{bmatrix}$$

Substituindo a equação (4.7) na expressão anterior chega-se, finalmente, ao seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}^{(\tau+1)} \\ \phi_{\sim 2}^{(\tau+1)} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}^{(\tau)} \\ \phi_{\sim 2}^{(\tau)} \end{pmatrix} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} \begin{pmatrix} C_{\sim l}^{(\tau)} \\ 0_{\sim}^{(\tau)} \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

onde os blocos de matrizes são dados por:

$$[T_{11}] = [I] - \Delta t [A_{11}]^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l [F_{11}]^{(\tau+1)}, \quad (4.9)$$

$$[T_{12}] = -[A_{12}]^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l [F_{12}]^{(\tau+1)}, \quad (4.10)$$

$$[T_{21}] = -[A_{21}]^{(\tau+1)}, \quad (4.11)$$

$$[T_{22}] = [I] - \Delta t [A_{22}]^{(\tau+1)}, \quad (4.12)$$

$$[R_{11}] = [I] + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l [F_{11}]^{(\tau)}, \quad (4.13)$$

$$[R_{12}] = \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l [F_{12}]^{(\tau)}, \quad (4.14)$$

$$\text{e } [R_{22}] = [I]. \quad (4.15)$$

Por fim, o sistema de equações lineares (4.21) é resolvido para cada passo Δt no tempo.

4.3.3 Os métodos de Runge-Kutta Generalizados de Rosenbrock

Métodos de Diferenças finitas na aplicação de equações diferenciais com variáveis no tempo, como os gerados a partir do método theta (Euler implícito e explícito, Crank-Nicolson) são por muitas vezes limitados devido à baixa precisão para elementos de baixa ordem (SUTTON e AVILES, 1996).

Essa seção, no entanto, apresenta uma classe de métodos implícitos que usam um esquema de altas ordens para melhorar a acurácia e permitir passos no tempo relativamente maiores. Inicialmente, os métodos implícitos eram geralmente utilizados em detrimento dos explícitos, visto que os explícitos sofrem da necessidade de passos no tempo muito pequenos para a obtenção de respostas mais exatas.

Ademais, era necessário um grande esforço computacional para lidar com métodos de alta ordem. Esse fato afastou a utilização desse tipo de método (de altas ordens) por um tempo, até que uma nova classe de Runge-Kutta foi desenvolvida, resolvendo essas deficiências dos métodos tradicionais.

A nova classe de Runge-Kutta utilizava um método de diferenças implícito nas equações que governam o sistema. Além disso, soluções incorporadas foram desenvolvidas no método de tal forma que o erro de truncamento pode ser monitorado e a seleção de controle de passo no tempo variável pode ser facilmente obtida. Esses métodos pertencem à classe dos que têm o objetivo de resolver os sistemas de equações rígidas.

Os Métodos de Runge-Kutta Generalizados de Rosenbrock (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992) possuem a vantagem de ser relativamente simples de entender e implementar. Para precisões moderadas ($\epsilon \lesssim 10^{-4}$ a 10^{-5} no critério erro) e sistemas de tamanhos moderados ($N \lesssim 10$), estes métodos são competitivos com outros algoritmos muito mais complexos (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992).

Métodos implícitos têm sido aplicados nos problemas de cinética espacial em vários casos. Um exemplo desse método é o de Runge-Kutta generalizado de Kaps-Rentrop, que é empregado no código SPANDEX (AVILES, 1993).

Esse método consegue obter soluções acuradas usando um passo no tempo relativamente grande e possui uma solução de terceira ordem contida na solução de quarta ordem. Com isso, as duas soluções podem ser usadas para controlar o tamanho do passo no tempo, fornecendo uma estimativa do erro de truncamento temporal.

Inicialmente, é preciso que seja trabalhado um método Generalizado de Runge-Kutta (GRK) que foi desenvolvido por Kaps e Rentrop (1979) e popularizado por Press, Teukolsky, *et al.* (1992). Este método obteve sucesso em aplicações para cinética pontual, cinética neutrônica de uma dimensão e também em códigos de difusão nodal de transientes (AVILES, 1993) já citado anteriormente.

O método Kaps-Rentrop (GRK) é um método implícito. Portanto, é necessário que seja realizado um método de diferenças implícito na equação a seguir, assumindo que $[A]$ é constante durante o passo no tempo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \varphi_{\sim} = [A] \varphi_{\sim} \quad (4.16)$$

$$[\varphi(t_{j+1})]_{\sim} = [\varphi(t_j)]_{\sim} + \tau_{j+1} [A(t_{j+1})][\varphi(t_{j+1})]_{\sim}. \quad (4.17)$$

Realizando uma expansão linear de Taylor de $[A(t_{j+1})][\varphi(t_{j+1})]$ em torno de t_j :

$$[A(t_{j+1})][\varphi(t_{j+1})] = [A(t_j)][\varphi(t_j)] + \tau_{j+1} \left[\frac{\partial}{\partial [\varphi]} [A][\varphi] \Big|_{[\varphi(t_j)]} \cdot \frac{\partial}{\partial t} [\varphi] \Big|_{t_j} \right]. \quad (4.18)$$

Realizando mais uma vez o método de diferenças finitas no último termo de (4.18), assumindo τ_{j+1} :

$$[A(t_{j+1})][\varphi(t_{j+1})] = [A(t_j)][\varphi(t_j)] + \tau_{j+1} \left[\frac{\partial}{\partial [\varphi]} [A][\varphi] \Big|_{[\varphi(t_j)]} \cdot \frac{[\varphi(t_{j+1})] - [\varphi(t_j)]}{\tau_{j+1}} \right]. \quad (4.19)$$

Substituindo (4.19) em (4.17), chega-se, finalmente, a:

$$[\varphi(t_{j+1})] = [\varphi(t_j)] + \tau_{j+1} \left\{ [A(t_j)][\varphi(t_j)] + \tau_{j+1} \left[\frac{\partial}{\partial [\varphi]} [A][\varphi] \right]_{[\varphi(t_j)]} \cdot \frac{[\varphi(t_{j+1})] - [\varphi(t_j)]}{\tau_{j+1}} \right\}$$

ou

$$\left[[I] - \tau_{j+1} \frac{\partial}{\partial [\varphi]} ([A][\varphi]) \right]_{[\varphi(t_j)]} [\varphi(t_{j+1})] = \left[[I] - \tau_{j+1} \frac{\partial}{\partial [\varphi]} ([A][\varphi]) \right]_{[\varphi(t_j)]} [\varphi(t_j)] + \tau_{j+1} \{ [A(t_j)][\varphi(t_j)] \}$$

onde o termo

$$\frac{\partial}{\partial [\varphi]} ([A][\varphi]) \Big|_{[\varphi(t_j)]}$$

é a derivada parcial no lado direito da equação (4.16) em relação as variáveis de estado estimadas em t_j . Na cinética dos nêutrons, esse termo corresponde ao coeficiente da matriz dos transientes numa difusão de nêutrons e das equações de precursores estimadas no início do passo de tempo t_j .

O método generalizado de Kaps-Rentrop Runge-Kutta pertence a uma classe de métodos chamada Rosenbrock-Warner. Esses métodos procuram a solução da equação (4.16) através de:

$$[\varphi(t_0 + \Delta t)] = [\varphi(t_0)] + \sum_{i=1}^s b_i k_i, \quad (4.20)$$

onde os vetores de correção k_i são obtidos pela solução do seguinte sistema de equações

$$\left([I] - \gamma \Delta t f' \right) k_i = \Delta t f \left([\varphi(t_0)] + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j \right) + \Delta t f' \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} k_j, \quad i = 1, \dots, s \quad (4.21)$$

e \underline{f} é o Jacobiano do sistema linear, $\underline{f} = \frac{\partial}{\partial t} \underline{\varphi}$, e os coeficientes γ , b_i , α_{ij} e γ_{ij} são constantes fixas independentes do problema. No caso de $\gamma = \gamma_{ij} = 0$, o método se reduz ao Runge-Kutta tradicional.

Para se elaborar um algoritmo de controle automático do tamanho do passo Δt , duas estimativas da forma da equação (4.17) são computadas: uma estimativa “real”, $\underline{\varphi}$, e outra estimativa de baixa ordem $\hat{\underline{\varphi}}$ calculada com diferentes coeficientes, \hat{b}_i , $i = 1, \dots, \hat{s}$, onde $\hat{s} < s$, mas com os mesmos \underline{k}_i . A diferença entre $\underline{\varphi}$ e $\hat{\underline{\varphi}}$ conduz a uma estimativa do erro de truncamento local, que pode ser utilizado para controlar o tamanho do passo Δt . Foi demonstrado por Kaps e Rentrop (1979) que o menor valor para s é 4 e para \hat{s} é 3, de modo que o método é de quarta ordem.

Os procedimentos acima podem ser generalizados de tal forma a levar em conta o caso em que a matriz coeficiente $[A]$ possa não ser constante durante um dado passo no tempo. Esse é geralmente o caso de um transiente de difusão de nêutrons, no qual as sessões de choque dos grupos estão mudando constantemente, possivelmente devido a uma variação de posição de uma barra de controle, envenenamento do produto de fissão ou algum outro mecanismo.

Baseado no algoritmo de Press, Teukolsky, *et al.* (1992) e Aviles (1993), generalizou-se o K-R GRK (método Kaps Rentrop para Runge Kutta Generalizado) para cálculos de transientes na teoria da difusão de nêutrons, incluindo termos que variassem de acordo com o passo no tempo.

Kaps e Rentrop utilizaram dois sets de parâmetros distintos em seu método (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992), que se diferenciam levemente um do outro pelos parâmetros de estabilidade. Porém, para o presente trabalho será utilizado apenas um desses parâmetros que será comparado com o parâmetro de Shampine (1982). O motivo de escolha desses parâmetros é que os demais sets de parâmetros requerem avaliações de funções fora do domínio de integração (PRESS, TEUKOLSKY, *et al.*, 1992).

4.3.4 Controle automático do passo no tempo para o K-R GRK

A disponibilidade de ter soluções de 3ª e 4ª ordem para um mesmo conjunto de vetores de expansão $\left[\tilde{k}_i(t_{j+1}) \right]$ torna possível monitorar o erro de truncamento dado um passo no tempo e ajustá-lo automaticamente. A habilidade de realizar este tipo de monitoramento sem aumentar os requerimentos computacionais do método de integração é uma grande vantagem do método sobre o método de passo duplo no tempo, por exemplo. Se realizarmos a seguinte denotação:

$$\left[\varphi_{4^a} \right] = \left[\tilde{\varphi}(t_{j+1}) \right] = \left[\tilde{\varphi}(t_j) \right] + \sum_{i=1}^4 b_i \left[\tilde{k}_i(t_{j+1}) \right] \quad (4.22)$$

$$\left[\varphi_{3^a} \right] = \left[\hat{\varphi}(t_{j+1}) \right] = \left[\tilde{\varphi}(t_j) \right] + \sum_{i=1}^3 b_i \left[\tilde{k}_i(t_{j+1}) \right]. \quad (4.23)$$

Então, a solução exata $\left[\varphi_{EXATA} \right]$ pode ser expressa da seguinte forma

$$\left[\varphi_{EXATA} \right] = \left[\varphi_{4^a} \right] + \tau_{j+1}^5 \left[g_{5^a}(t_{j+1}) \right] + \dots = \left[\varphi_{3^a} \right] + \tau_{j+1}^4 \left[g_{4^a}(t_{j+1}) \right] + \dots \quad (4.24)$$

onde $\left[g_{5^a} \right]$ e $\left[g_{4^a} \right]$ representam termos de alta ordem. Assim, o erro máximo de truncamento local escalado para todos os grupos e precursores em um dado tempo é:

$$Err = \max_m \left| \frac{y_{m,4^a} - y_{m,3^a}}{y_{m,escala}} \right| = \max_m \left| \frac{\tau_{j+1}^4 g_{m,4^a}(t_{j+1}) + \dots}{y_{m,escala}} \right| \quad \text{para } m=1, \dots, N, \quad (4.25)$$

onde $\left[y_{escala} \right]$ é um vetor de escala apropriado.

Mais uma vez, para um passo de integração bem-sucedido, é preciso que o valor do erro de truncamento escalado máximo seja menor que uma tolerância especificada pelo usuário \mathcal{E} . Por exemplo, considerando o caso onde o passo no tempo, τ_{t+1} , foi realizado com sucesso. Para que o passo seguinte τ_{t+2}

também seja realizado de forma eficaz, é fundamental que o seu erro seja menor que a faixa de tolerância especificada,

$$\max_m \left| \frac{\tau_{j+2}^4 g_{m,4^a}(t_{j+2}) + \dots}{y_{m,escala}} \right| < \varepsilon \text{ para } m = 1, \dots, N. \quad (4.26)$$

Pelo fato de não ser conhecido ainda o erro de truncamento do próximo passo no tempo, assume-se que o vetor erro de truncamento, $[g_{4^a}]$, permaneça constante, isto é,

$$g_{m,4^a}(t_{j+2}) = g_{m,4^a}(t_{j+1}). \quad (4.27)$$

Com essa premissa, uma estimativa do tamanho do próximo passo no tempo satisfazendo a faixa de tolerância do erro de truncamento é:

$$\tau_{j+2} \leq \tau_{j+1} \left(\frac{\varepsilon}{Err} \right)^{\frac{1}{4}}. \quad (4.28)$$

Ocasionalmente, um fator de segurança é incluído na estimativa de τ_{t+2} para considerar a incerteza da suposição feita quando o erro de um passo no tempo anterior é usado como uma estimativa para o próximo passo no tempo.

Também, τ_{t+2} , deve ser limitada para reduzir o número de passos rejeitados, prevenindo assim um comportamento de “zig-zag” em passos no tempo bem-sucedidos. Em suma, se uma integração de passo no tempo é bem-sucedida, a solução de quarta ordem da equação (4.22) é aceita e o próximo passo no tempo é escolhido usando a equação (4.28). Se um passo no tempo falha no teste da equação (4.26), a solução é rejeitada, então, o processo é repetido usando um passo no tempo menor, computado da equação (4.28).

A partir do próximo capítulo, será apresentada a validação dos programas desenvolvidos para que, posteriormente, eles venham a ser aplicados em diferentes transientes envolvendo uma fonte externa. Essa, por sua vez, pode ser uma fonte geradora de nêutrons diretamente ou um acelerador de partículas, que acelera prótons em direção ao alvo de spallation, gerando nêutrons como

consequência. Cabe enfatizar que o método como são gerados os nêutrons (direta ou indiretamente) não interfere no comportamento final do reator.

4.4 Discretização Temporal das Equações da Cinética Espacial com Fonte Externa

Considerando a presença de fonte externa em reatores do tipo ADS, a equação 4.15 fica na seguinte forma:

$$[\nu]^{-1} \frac{d}{dt} \Phi(t) + [B(t)] \Phi(t) = [S(t)] \Phi(t) + (1 - \beta) [F(t)] \Phi(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l c_l(t) + S_{es},$$

onde o termo S_{es} representa a fonte externa.

O Método de Euler implícito aplicado à equação anterior conduz à seguinte expressão:

$$[\nu]^{-1} \left(\frac{\Phi^{(\tau+1)} - \Phi^{(\tau)}}{\Delta t} \right) = -[B]^{(\tau+1)} \Phi^{(\tau+1)} + (1 - \beta) [F]^{(\tau+1)} \Phi^{(\tau+1)} + [S]^{(\tau+1)} \Phi^{(\tau+1)} + S_{es} + \sum_{l=1}^6 \lambda_l c_l^{(\tau+1)},$$

a qual pode ser colocada na seguinte forma:

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \phi \end{pmatrix}^{(\tau+1)} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ 0 & R_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \phi \end{pmatrix}^{(\tau)} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} \begin{pmatrix} C \\ 0 \end{pmatrix}^{(\tau)} + \begin{pmatrix} \nu_1 \Delta t S_1 \\ \nu_2 \Delta t S_2 \end{pmatrix}$$

onde os blocos de matrizes são os mesmos apresentados na seção 4.3.2.

5 RESULTADOS

A partir das fundamentações teóricas apresentadas nos capítulos anteriores, foi elaborado um código desenvolvido para modelar alguns transientes em reatores do tipo ADS.

Estudos na literatura sobre transientes específicos de reatores tipo ADS, tais como flutuações do feixe de prótons, especialmente, em problemas unidimensionais, não são fáceis de serem encontrados. Portanto, para realizar a validação dos códigos, simulações com *Benchmarks* conhecidos sem a presença da fonte foram realizadas. Com o código já testado e validado, efetivou-se a fase objetivo do presente trabalho: simular transientes em um sistema subcrítico envolvendo uma fonte externa.

5.1 Validação do código

Como dito anteriormente, para que seja possível testar o método desenvolvido, é fundamental utilizá-lo em uma simulação da qual exista uma referência. Para isso, o Benchmark BSS-6 (STACEY JR, 1985; NAGAYA e KOBAYASHI, 1995) foi escolhido.

Esse *Benchmark* é muito conhecido e trata justamente de transientes em um reator tipo slab unidimensional. Mais detalhes sobre este *Benchmark* podem ser encontrados no Apêndice.

Para que o código desenvolvido tenha uma validade mais consistente, dois diferentes transientes dentro deste benchmark serão realizados: o caso BSS-6-A1 e BSS-6-A2.

Nos dois casos foi considerado uma malha espacial de 1cm, um passo no tempo de 0,001s para o Método Implícito de Euler e uma tolerância de 0,001 para o Método de Runge-Kutta.

5.1.1 Transiente de validação 1: BSS-6-A1

No caso do BSS-6-A1, ocorrerá um aumento linear de 3% da seção de choque de absorção na região 1 do reator, no primeiro segundo. Após esse aumento, é mantida essa configuração constante até o segundo 4. Então, tem-se o seguinte comportamento de fluxo para os grupos rápidos e térmicos:

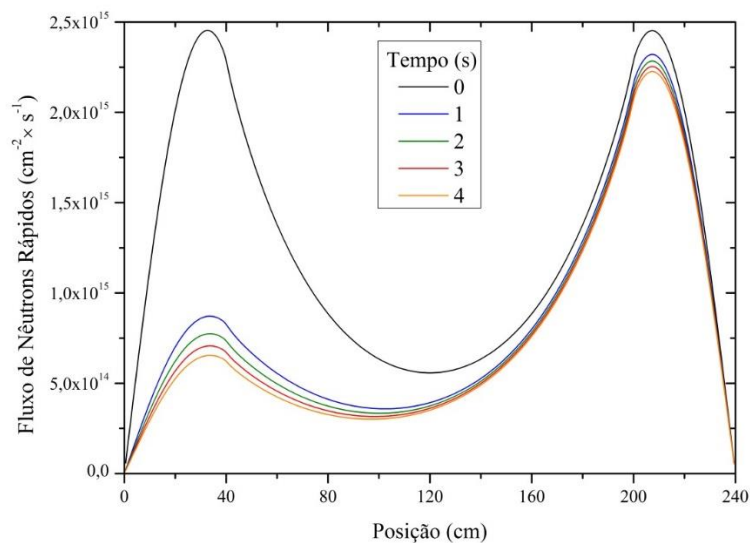


Figura 11 - Fluxo de Nêutrons Rápidos no BSS-6 A1

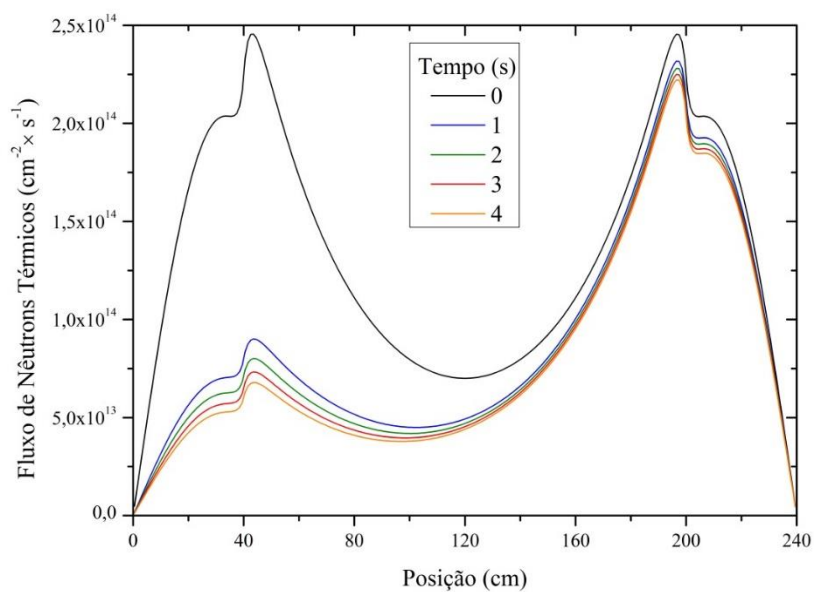


Figura 12 - Fluxo de Nêutrons Térmicos no BSS-6 A1

Os resultados encontrados utilizando os diferentes métodos citados, com os diferentes parâmetros, apresentaram os seguintes resultados:

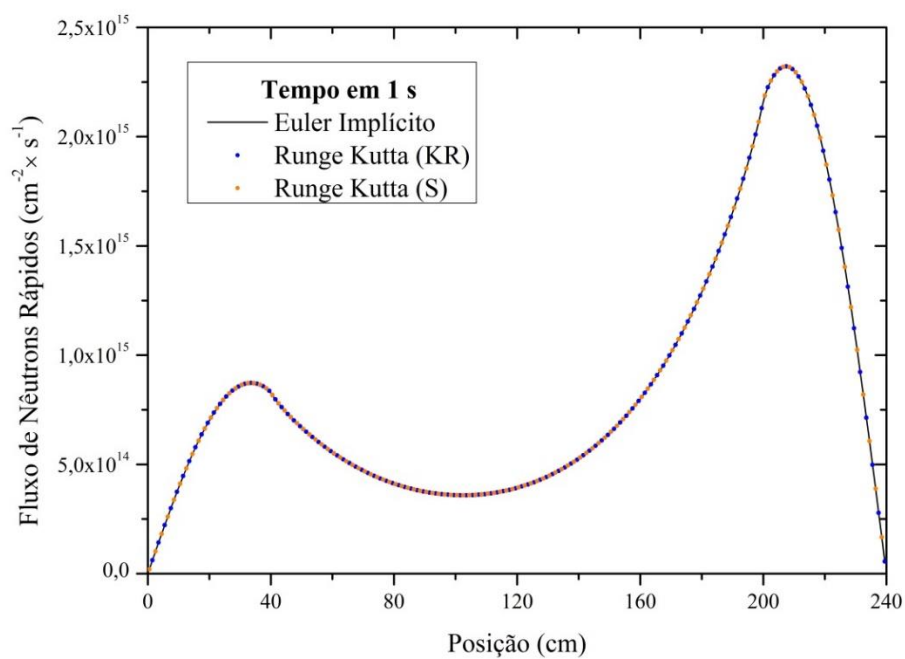


Figura 13 - Fluxo Rápido em $t=1$

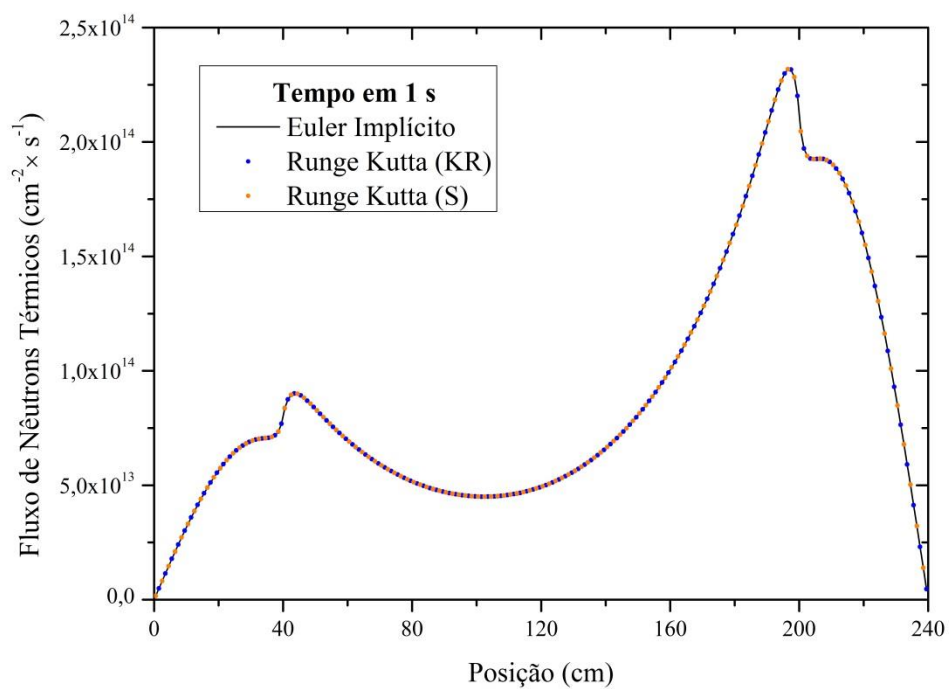
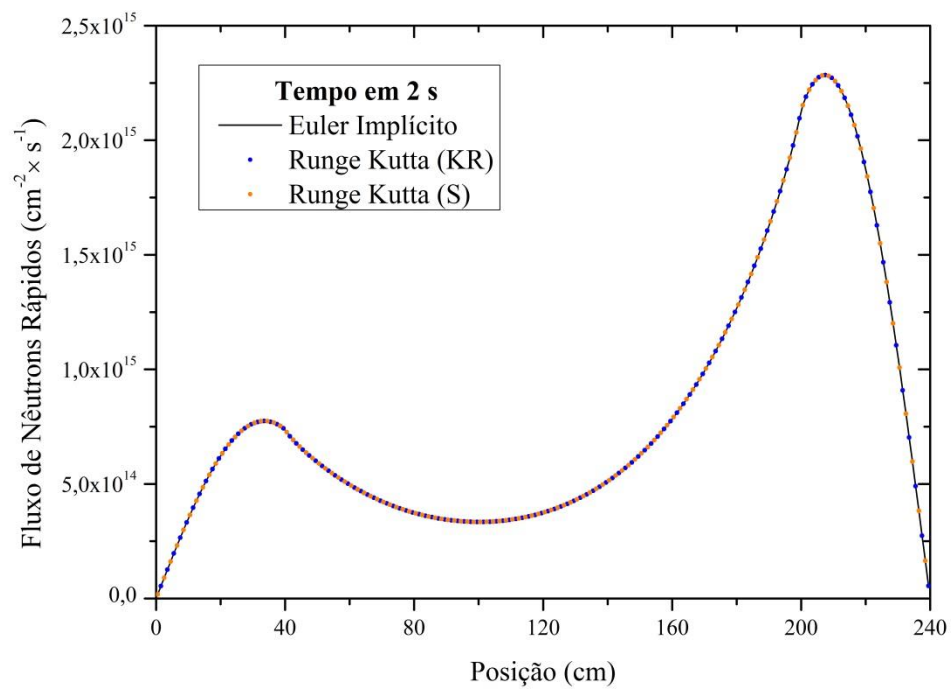
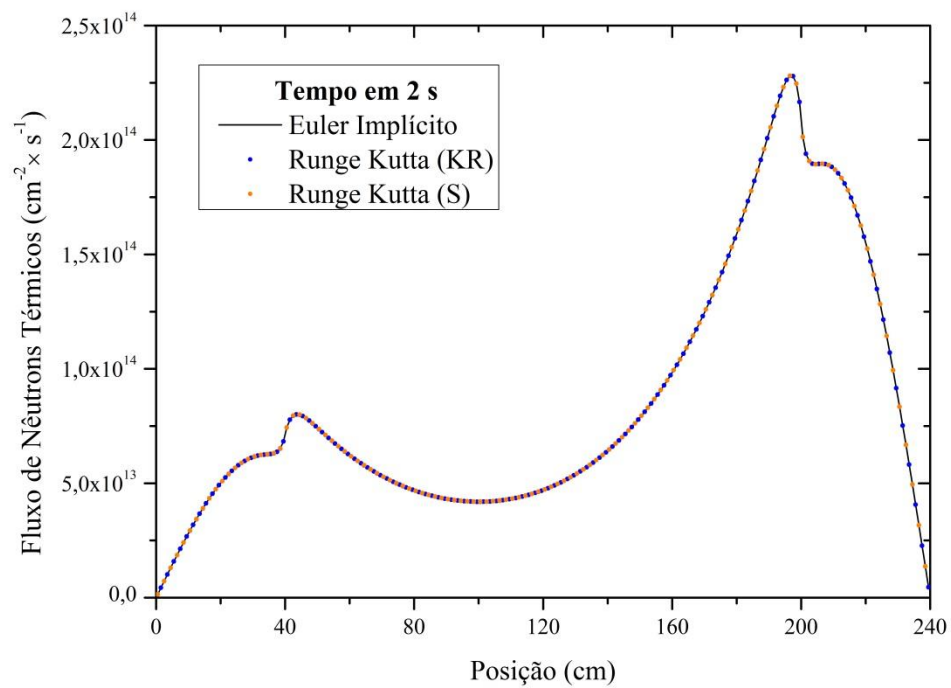
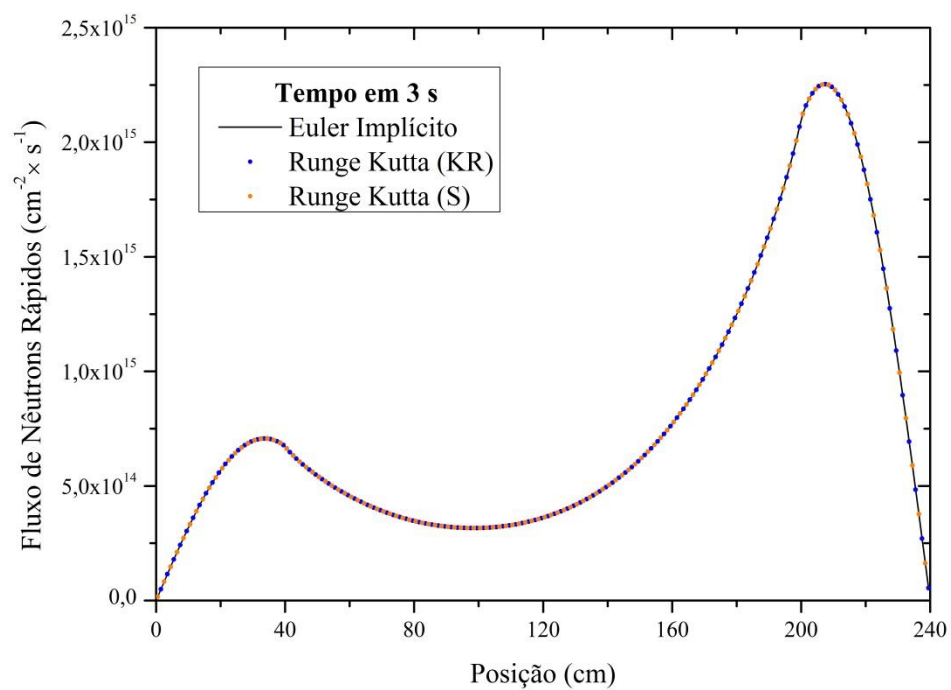
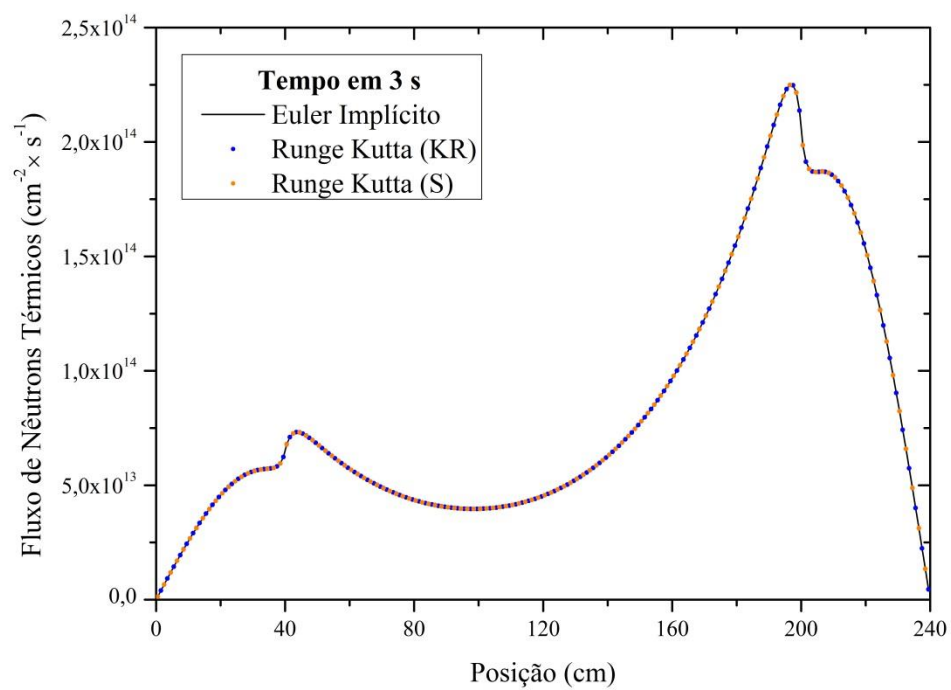
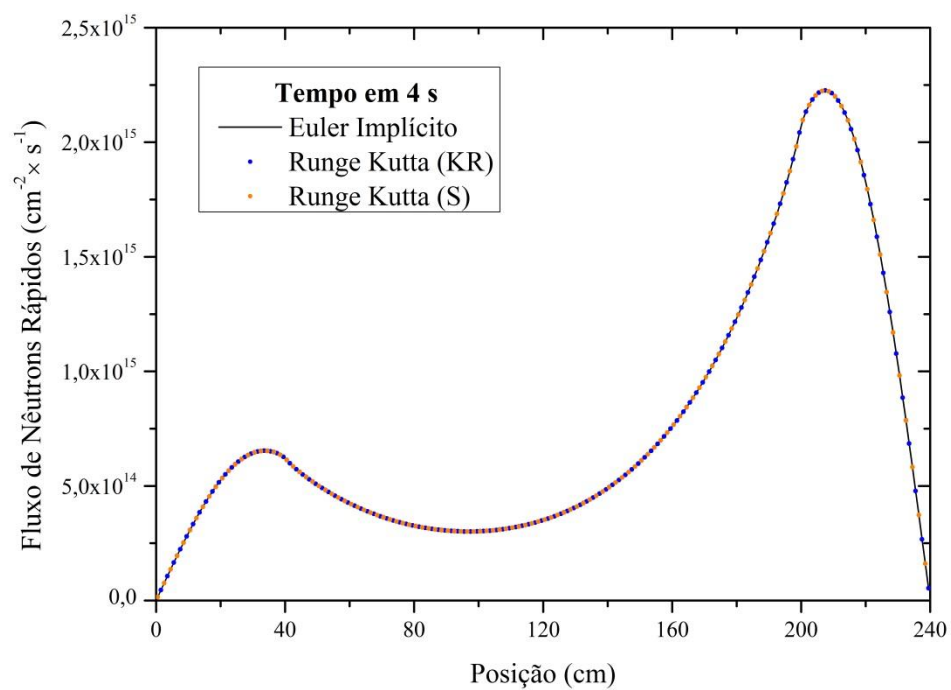
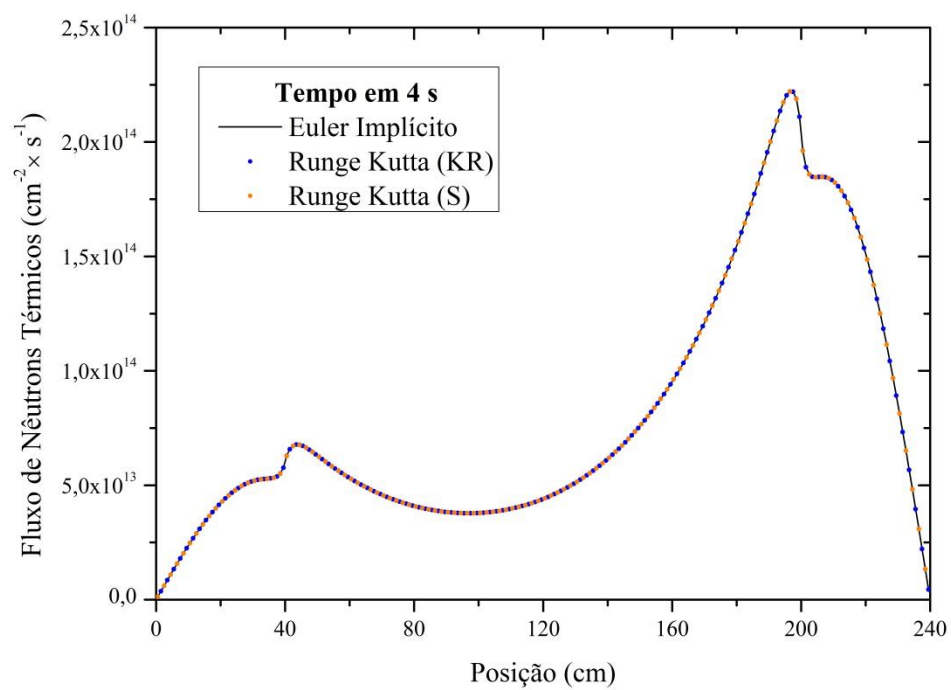


Figura 14 - Fluxo Térmico em $t=1$

Figura 15 - Fluxo Rápido em $t=2$ Figura 16 - Fluxo Térmico em $t=2$

Figura 17 - Fluxo Rápido em $t=3$ Figura 18 - Fluxo Térmico em $t=3$

Figura 19 - Fluxo Rápido em $t=4$ Figura 20 - Fluxo Térmico em $t=4$

Já a variação de Potência Relativa (em relação ao valor inicial) fica da seguinte forma:

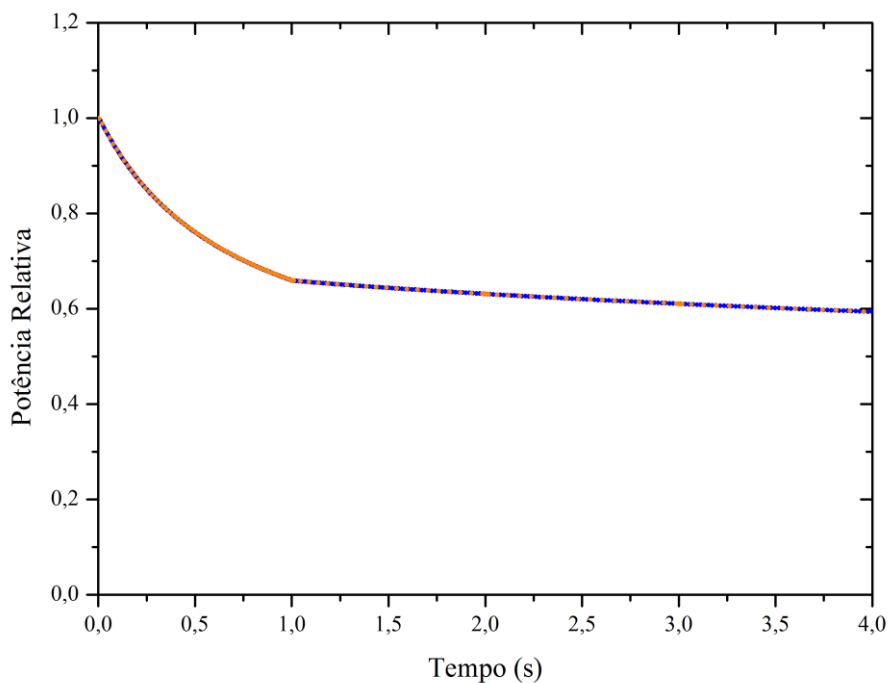


Figura 21 - Variação de potência relativa caso A1

5.1.2 Transiente de validação 2: BSS-6-A2

Para o caso do BSS-6-A2, tem-se a mesma geometria de reator, porém, ao invés de se aumentar a seção de choque de absorção, ela foi reduzida em 1% no segundo $t=1$, e essa configuração mantida constante até o segundo $t=4$.

Feito isso, os seguintes resultados foram obtidos para os diferentes métodos e parâmetros:

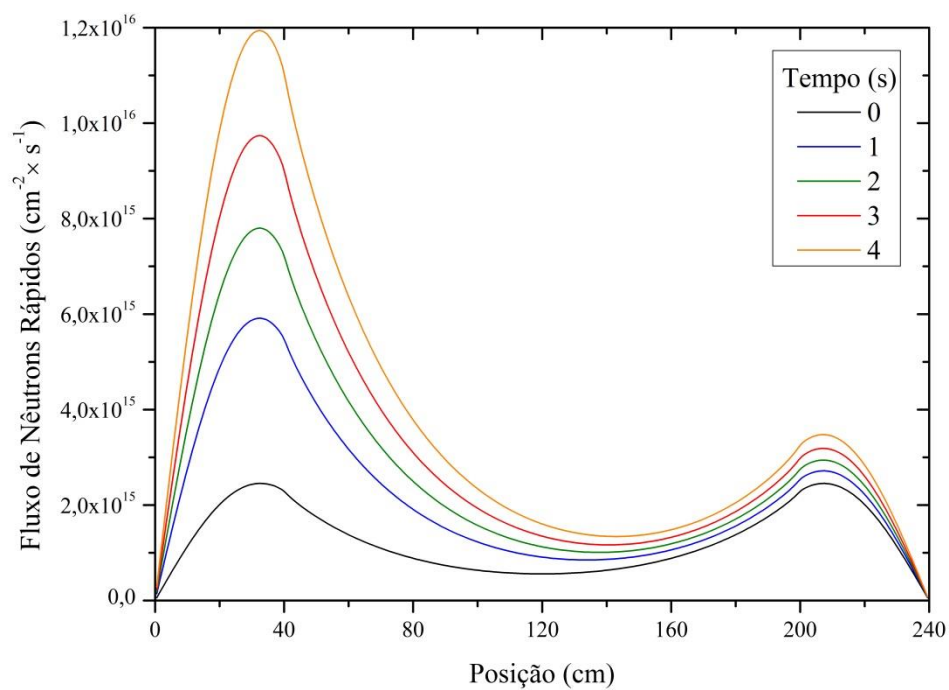


Figura 22 - Fluxo de Nêutrons Rápidos no BSS-6 A2

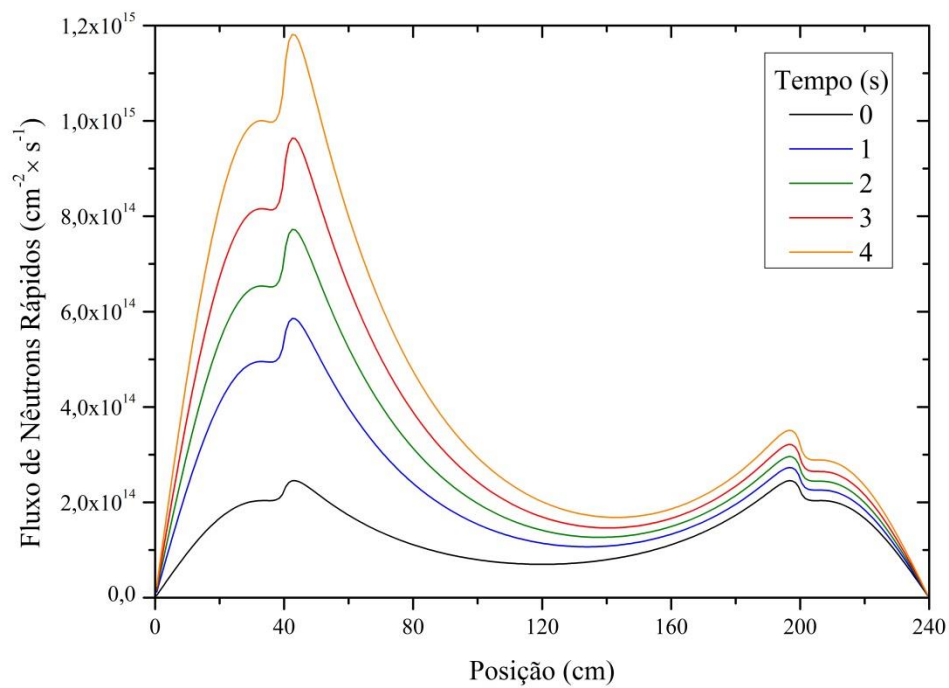


Figura 23 - Fluxo de Nêutrons Térmicos no BSS-6 A2

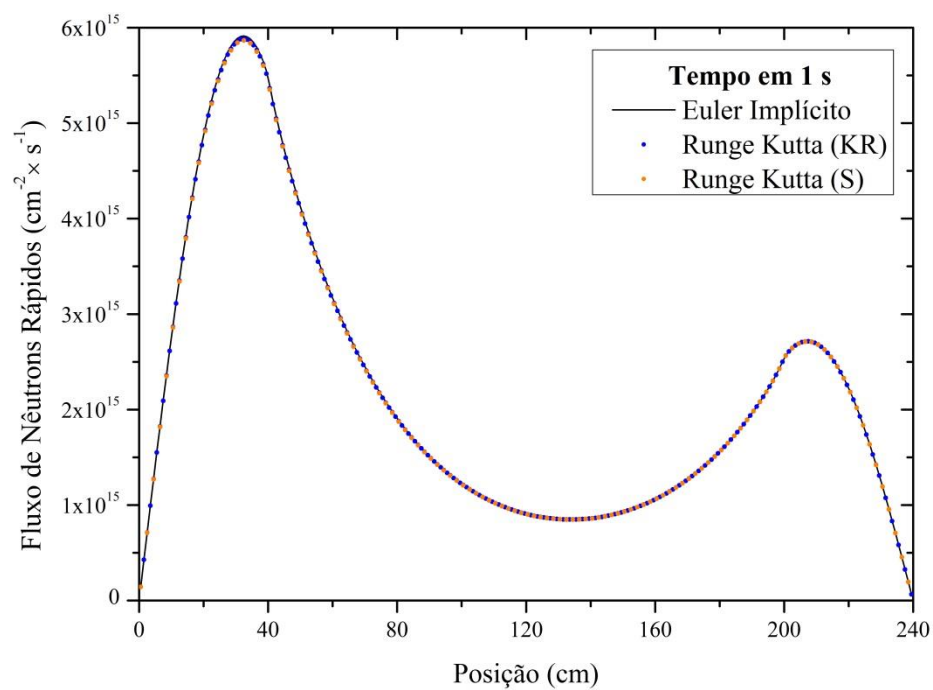


Figura 24 - Fluxo Rápido caso 2, $t=1$

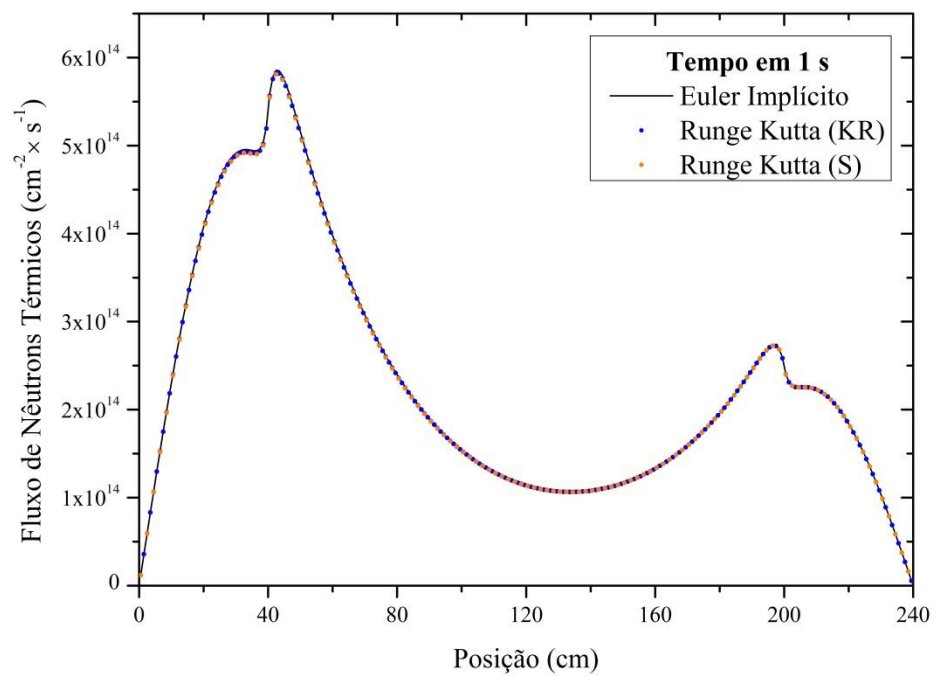


Figura 25 - Fluxo Térmico caso 2, $t=1$

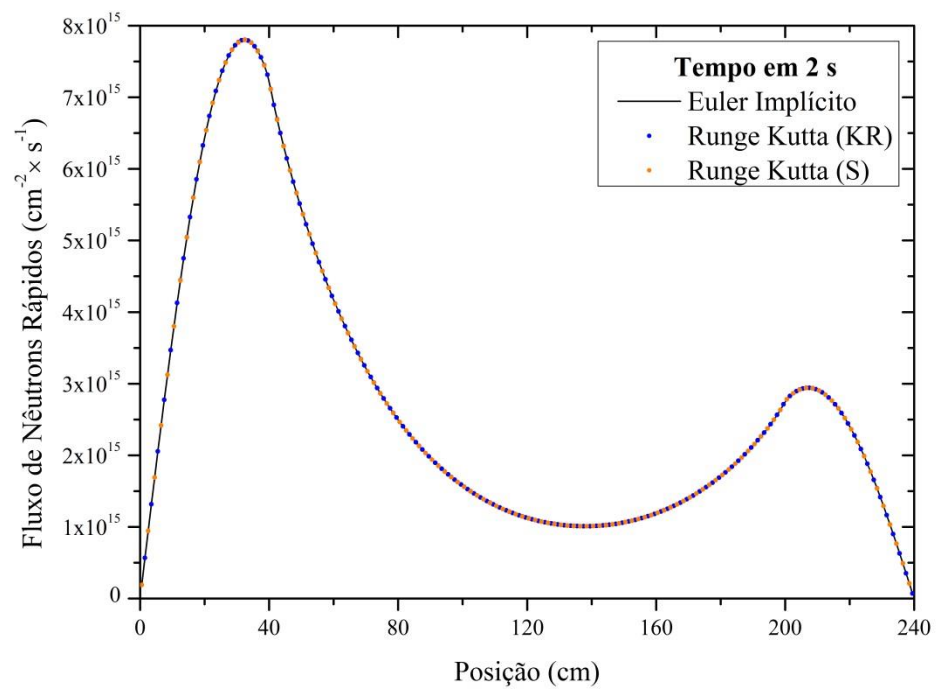


Figura 26 - Fluxo Rápido caso 2, $t=2$

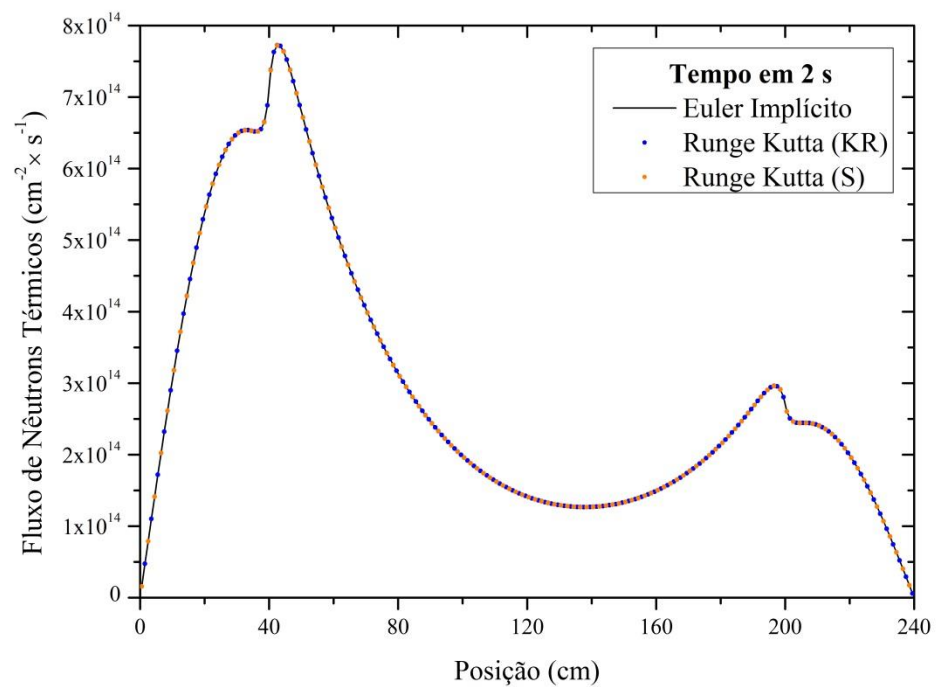


Figura 27 - Fluxo Térmico caso 2, $t=2$

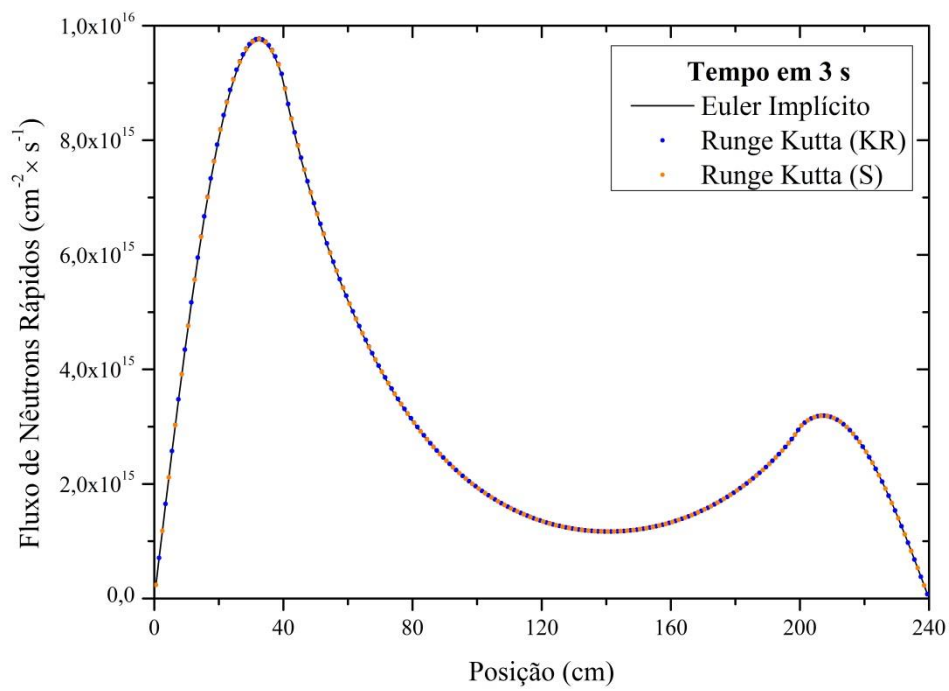


Figura 28 - Fluxo Rápido caso 2, $t=3$

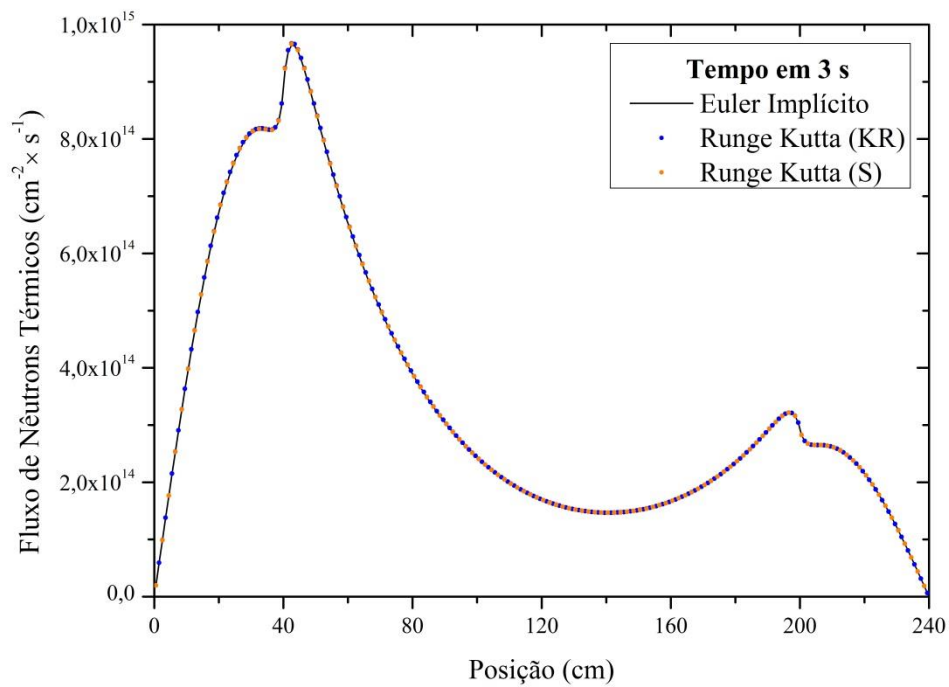


Figura 29 - Fluxo Térmico caso 2, $t=3$

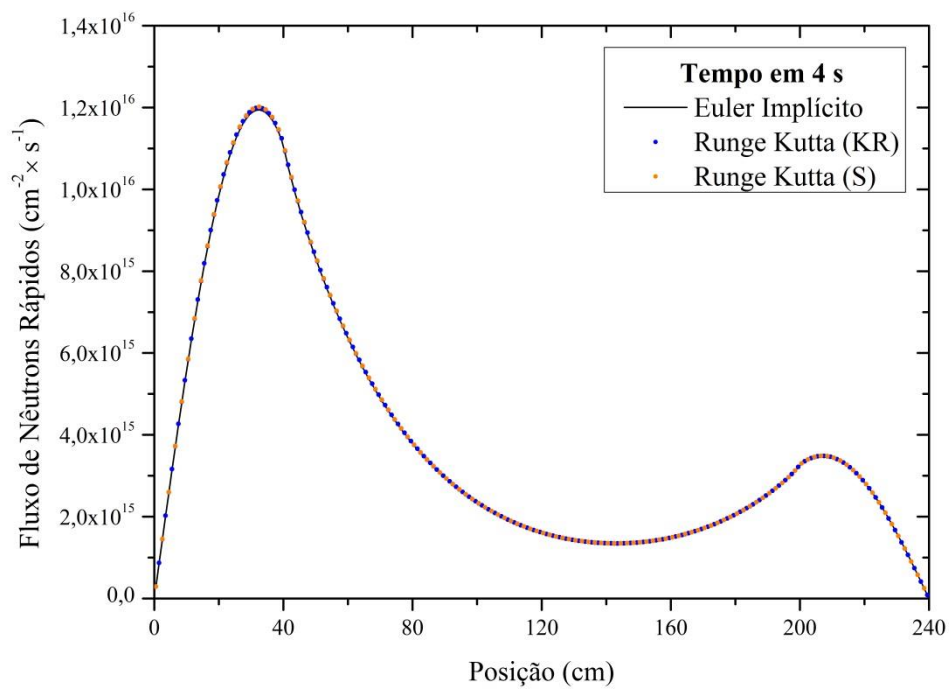


Figura 30 - Fluxo Rápido caso 2, $t=4$

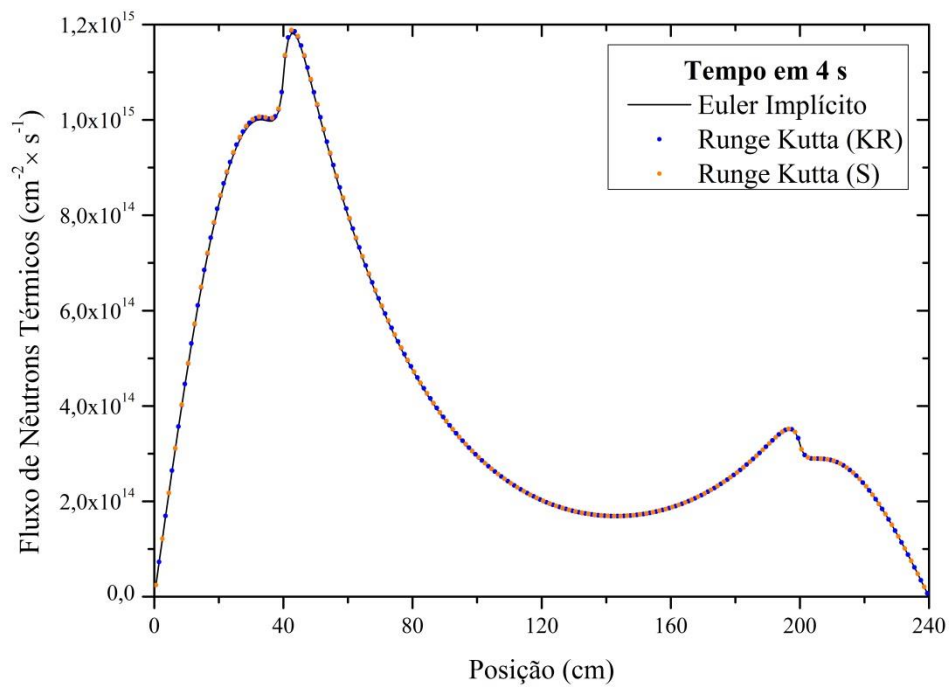


Figura 31 - Fluxo Térmico caso 2, $t=4$

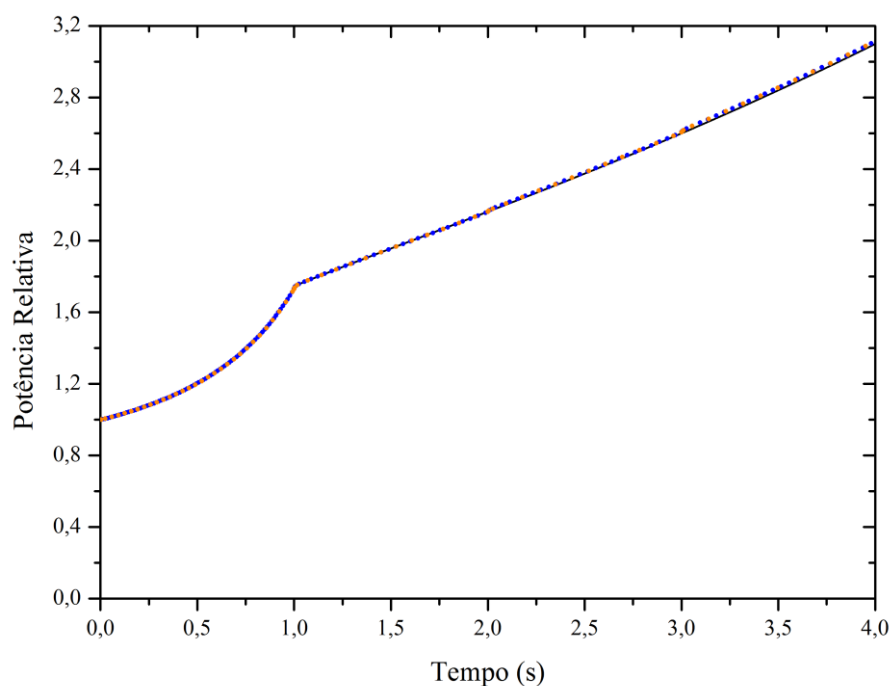


Figura 32 - Variação da Potência relativa caso 2

Na tabela 2, a seguir, são listados os tempos de CPU obtidos em cada caso simulado:

Tabela 2 - Tempo de Processamento BSS6 - caso 1 e caso 2

Tempo de Processamento (s)		
Método	BSS6 - Caso 1	BSS6 - Caso 2
Euler Implícito	28,95	45,52
Runge-Kutta (KR)	63,80	31,47
Runge-Kutta (S)	42,39	26,24

Observa-se que Método de Euler implícito tem um tempo muito menor do que os outros métodos para o caso 1. Já para o caso 2, o Método de Runge-Kutta com os parâmetros de Shampine apresentou um tempo muito menor.

5.2 Simulação de cenários de acidentes em ADS.

Para o presente trabalho, existe o interesse de analisar como varia a potência de sistemas subcríticos quando ocorrem diferentes tipos de variações no feixe de prótons.

Alterações de intensidade no feixe de prótons podem vir a ocorrer de três formas. A primeira representa flutuações de potência causadas por repetitivas interrupções (trips) do feixe, ou Accelerator Beam Interruptions (ABI). O segundo caso seria a ocorrência de um pico de potência no feixe, ou Accelerator Beam Overpower (ABO), que é quando a fonte externa toma valores acima do esperado em relação a intensidade. Por fim, o terceiro caso seria a situação em que a fonte de prótons é ligada.

O processo de início da fonte é de suma importância, pois é somente a partir de seu funcionamento, que um reator tipo ADS atinge níveis de criticalidade, adicionando nêutrons provenientes do alvo de *spallation*, que, por sua vez, contribuirão na fissão nos elementos combustíveis.

Ambas situações podem ser problemáticas para reatores do tipo ADS, pois podem causar fadiga térmica nos seus componentes, acarretando falhas prematuras no sistema, e também prejudicam no fornecimento contínuo de energia para o caso de reatores de potência.

Devido a esta relevância no estudo de reatores ADS, essas três situações foram simuladas para o reator unidimensional descrito no Apêndice, apenas inserindo na região central o alvo de *spallation*. Dessa forma, o sistema utilizado é o representado pela figura 33 a seguir:

REATOR SLAB BSS6 COM FONTE

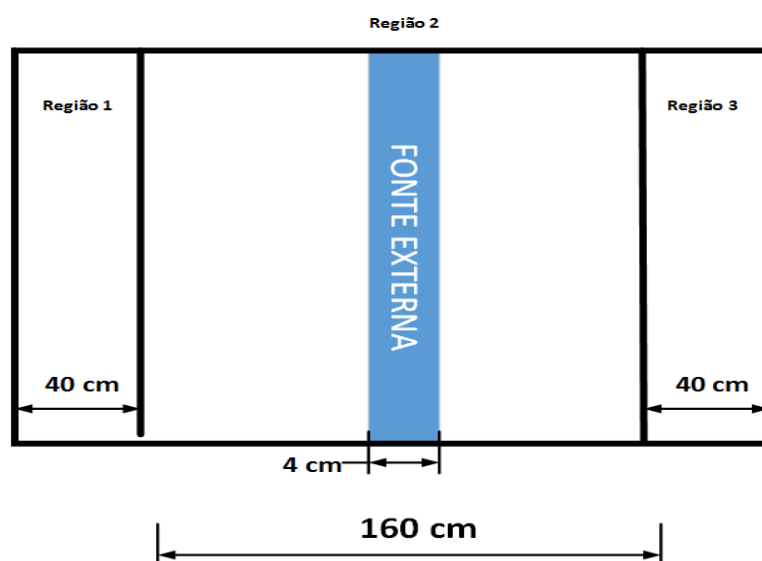


Figura 33 - Geometria 1D para um Reator ADS⁵

Os parâmetros nucleares são mesmos do BSS6 e é considerado fluxo nulo na região externa ao reator.

5.2.1 Interrupção no feixe de prótons - ABI

Os sistemas tipo ADS estão sendo desenvolvidos com feixes pulsados de prótons. Porém, as frequências de operação são tão elevadas (na faixa de 175 MHz para o primeiro, 350 para o segundo e 750 para o terceiro feixe) que podemos considera-lo como contínuo. Portanto, essa aproximação será adotada nas análises a seguir.

No presente trabalho, foi utilizado como modelo o transiente sugerido por Figueira (2015), no qual é introduzida uma interrupção de 2 segundos no feixe. Assim, os parâmetros utilizados pela fonte seguiram um padrão similar ao do autor e estão representados na tabela a seguir:

⁵ Largura da fonte na imagem fora de escala para melhor compreensão da imagem.

Frequência (MHz)	Nêutrons/s	Instante Início (s)	Duração do ABI (s)
350	10^{14}	1	2

Nas figuras a seguir, observa-se que as repostas às variações da fonte são extremamente rápidas, fazendo com que a potência do sistema decaia rapidamente para o seu estado característico, o subcrítico, mostrando, assim, uma segurança intrínseca maior em relação aos críticos.

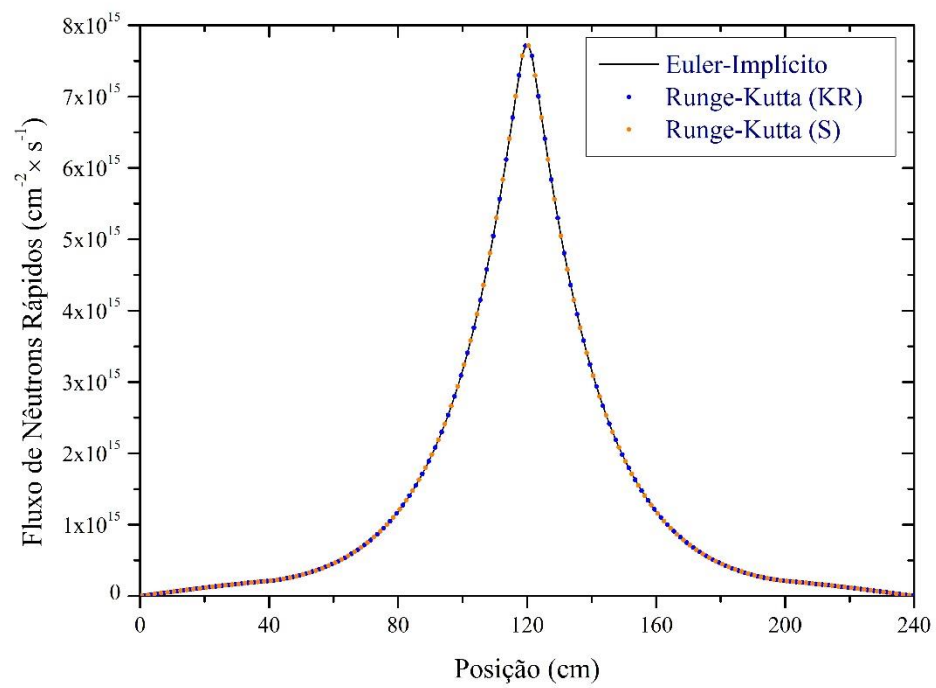
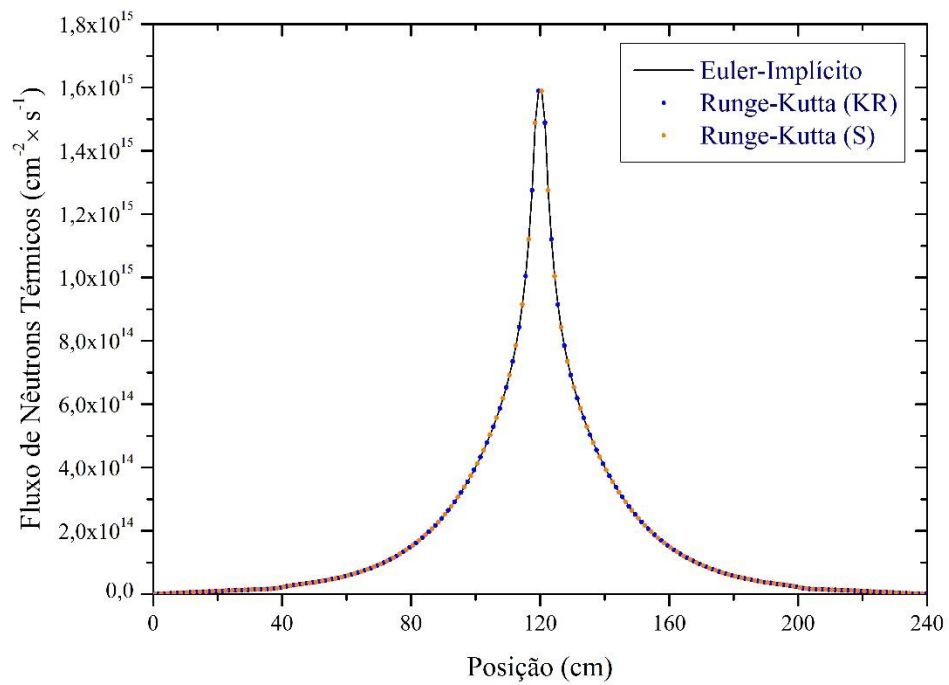
Quando o feixe de prótons é retornado à posição inicial, a potência também responde rapidamente, se elevando em um curto espaço de tempo. No entanto, o nível de potência reestabelecido pós reinserção da fonte é reduzido em relação ao inicial. Esta redução será tanto maior quanto maior for o intervalo de tempo no qual a fonte permanecer fora de funcionamento e também de acordo com o nível de subcriticalidade for o Reator em questão.

Portanto, para que o nível inicial seja reestabelecido, faz-se necessário um aumento da intensidade da fonte externa e um posterior reajuste de potência quando o sistema voltar ao seu estado normal.

Ainda de acordo com Figuera (2015), sistemas do tipo ADS possuem um limiar na razão nêutrons/prótons, de forma que um possível aumento na frequência de operação, pode inutilizar ou até reduzir ainda mais a emissão de nêutrons.

De acordo com (ABDERRAHIM, KUPSCHUS, *et al.*, 2001), para o projeto de reator de pesquisa tipo ADS MYHRRRA, considera-se acidental qualquer condição ABI com duração superior a 3 segundos ou uma sequência de mais de 10 eventos de ABI num mesmo ciclo de operação, que é definido por projeto como um período de 250 horas.

Os seguintes resultados de fluxos neutrônicos para os diferentes métodos e propriedades foram obtidos:

Figura 34 - Fluxo Rápido BSS6 ABI para $t=1$ Figura 35 - Fluxo Térmico BSS6 ABI para $t=1$

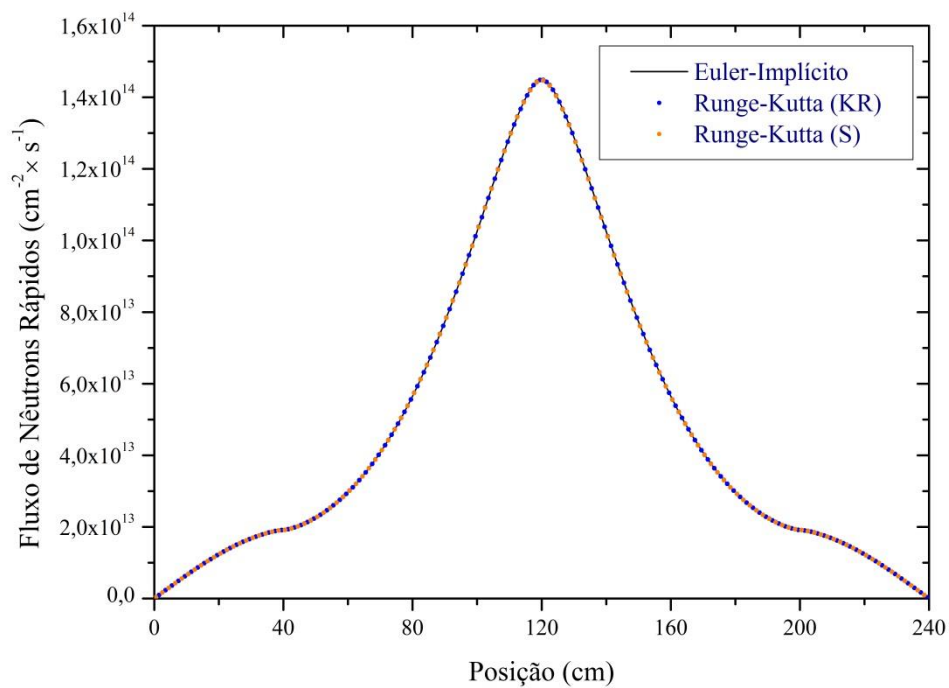


Figura 36 - Fluxo Rápido BSS6 ABI para $t=3$

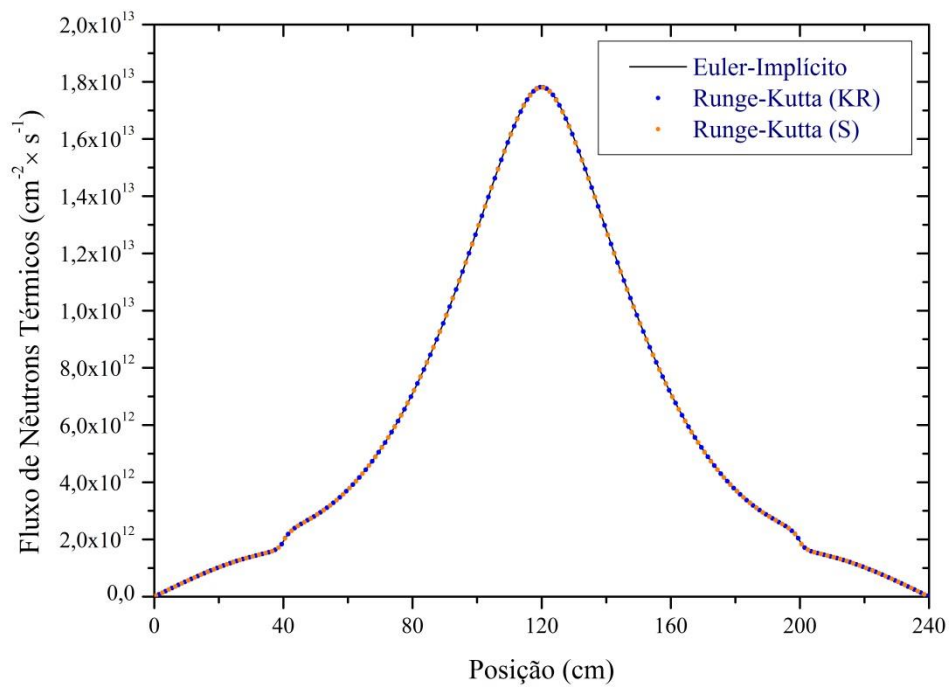


Figura 37 - Fluxo Térmico BSS6 ABI para $t=3$

E a variação de potência relativa se comportou da seguinte forma:

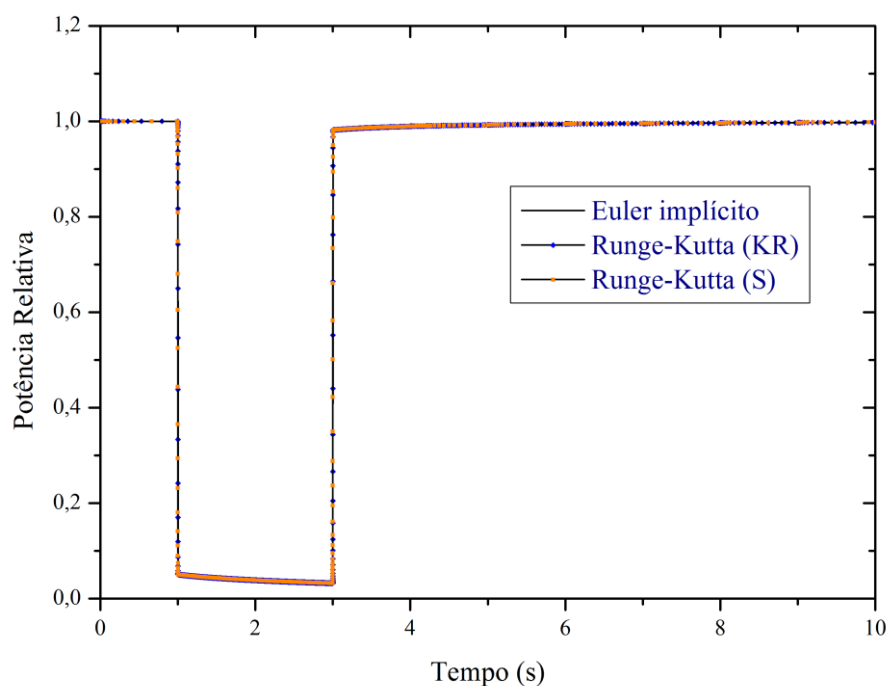


Figura 38 - Variação de Potência Relativa ABI

É importante notar que a queda de potência durante o período de redução do fluxo de prótons sinaliza que o reator está em estado subcrítico.

5.2.2 Aumento na intensidade do feixe de prótons – ABO

Casos de aumento da intensidade do feixe de prótons também podem ocorrer de forma inesperada em reatores do tipo ADS. Portanto, é crucial que exista uma atenção especial a este tipo de caso, pois representa uma situação de risco devido ao desgaste e superaquecimento anormal do alvo de *Spallation*.

O ABO é um evento de aumento não-intencional na intensidade do feixe de prótons e caracteriza uma condição acidental devido à grande sensibilidade do sistema às variações da fonte, como demonstrado no caso de ABI na subseção anterior.

Isto quer dizer que mesmo um pequeno aumento na intensidade do feixe de prótons pode acarretar uma elevação de potência do reator em um intervalo muito curto de tempo. Tal condição pode causar sérios danos permanentes, tanto ao reator, quanto ao próprio acelerador de partículas. Diferentemente do

caso ABI, um transiente do tipo ABO tende a desgastar todo o equipamento devido a fadiga térmica, podendo inviabilizar economicamente todo o projeto da planta.

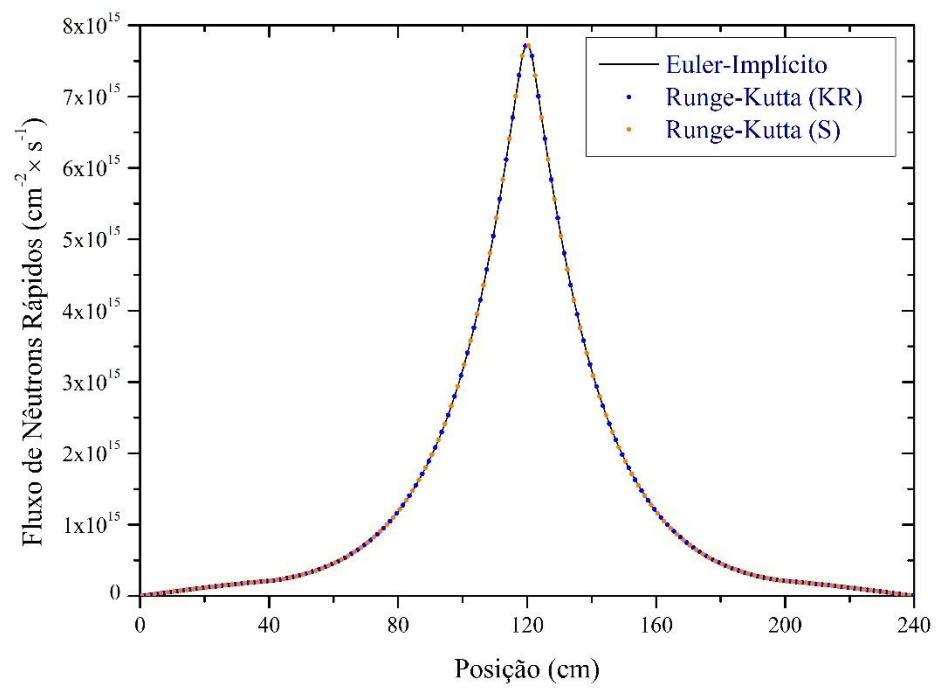
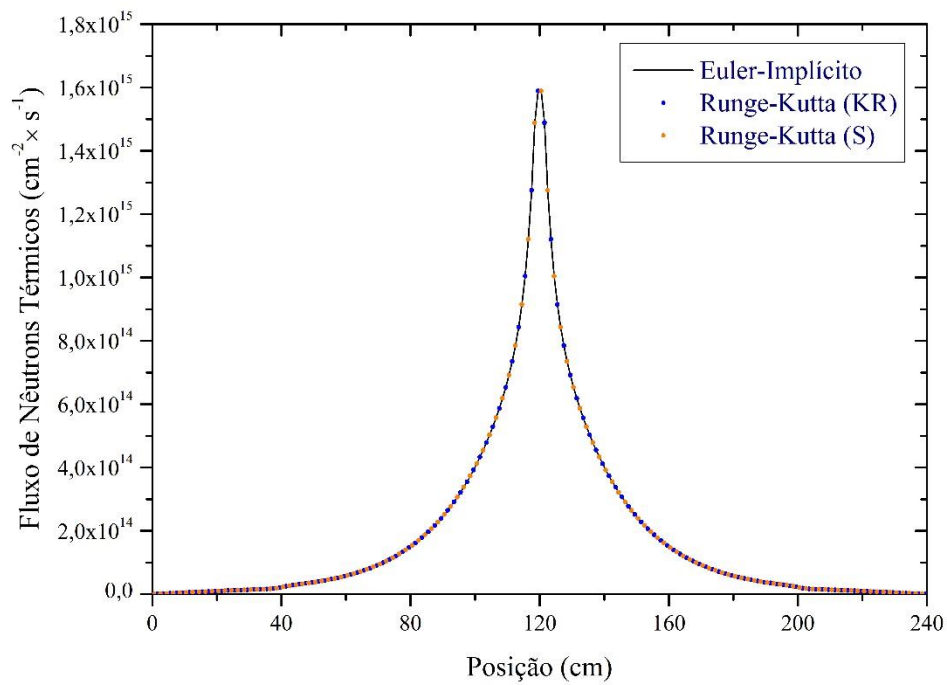
Apesar de eventos do tipo ABO serem mais prováveis de ocorrer durante intervalos mais curtos de tempo (na ordem de milissegundos), é importante que seja realizado um estudo para acontecimentos do tipo devido à possibilidade de erros humanos no processo. Assim, é necessário que uma maior atenção seja dada ao efeito no revestimento do elemento combustível para prevenção da liberação de produtos de fissão em forma de gás, característicos de reatores tipo ADS (OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY, 2002).

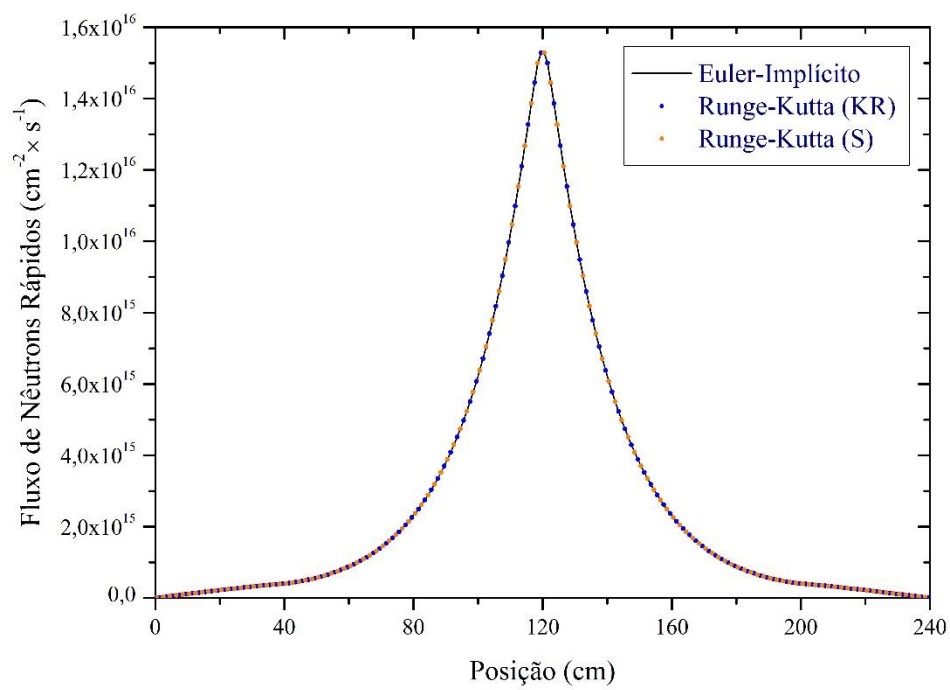
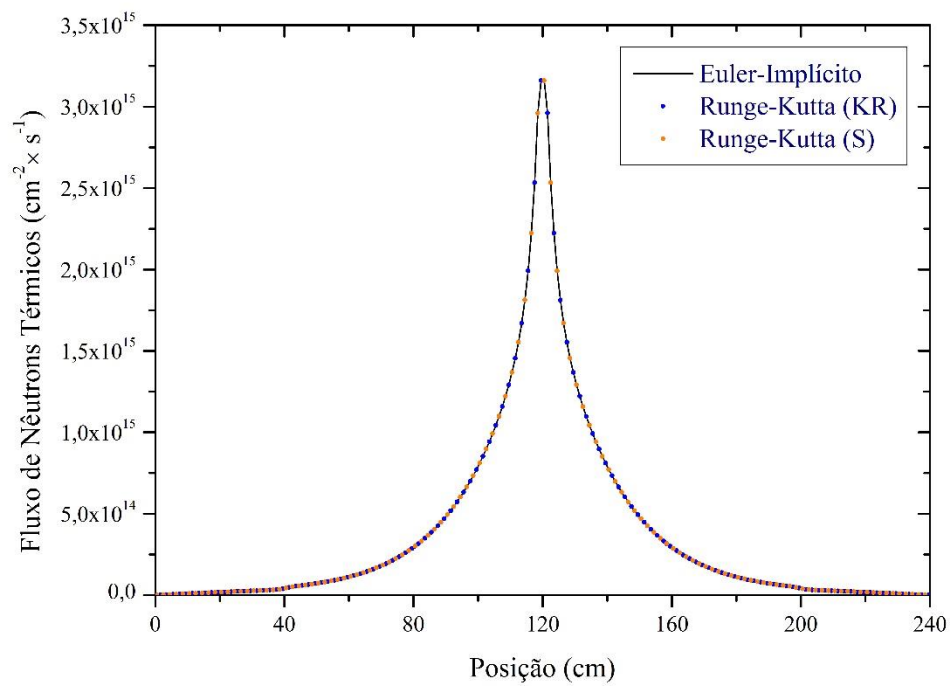
No presente trabalho, foi simulada uma variação de 100% na potência durante dois segundos. Como o reator é projetado para funcionar em condição estacionária enquanto a fonte estiver ativa (FIGUEIRA, 2015), este aumento na intensidade da fonte faz com que o reator se comporte de maneira supercrítica ($K > 1$). Este comportamento não terminará enquanto o acelerador estiver nesse estado de aumento de fluxo. Esta situação pode ilustrar um possível ligamento simultâneo dos aceleradores primário e o de backup (no caso de projetos que possuem essa redundância).

A fonte utilizada nesta simulação possui as seguintes características:

Frequência (MHz)	Nêutrons/s	Instante Início (s)	Duração do ABO (s)
350	10^{14}	1	2

Considerando as premissas destacadas anteriormente, os seguintes resultados para os fluxos e para a variação de potência foram obtidos, para os intervalos de tempo $t=1s$ e $t=3s$, que representam os períodos relativos ao início e ao fim do período de potência dobrada:

Figura 39 - Fluxo Rápido BSS6 ABO $t=1$ Figura 40 - Fluxo Térmico BSS6 ABO $t=1$

Figura 41 - Fluxo Rápido BSS6 ABO $t=3$ Figura 42 - Fluxo Térmico BSS6 ABO $t=3$

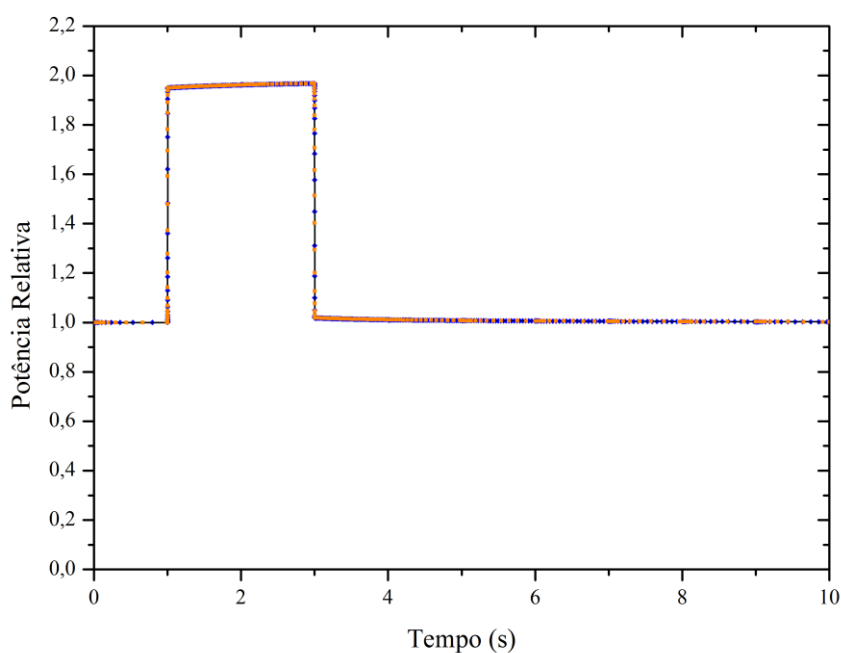


Figura 43 - Variação de potência relativa para ABO

É interessante notar o aumento de potência durante o período de dobra do fluxo de nêutrons, sinalizando o estado supercrítico do reator.

5.2.3 Start da fonte externa

Este último caso também merece atenção, uma vez que é um procedimento que precisa ocorrer para que o sistema atinja o ponto de criticalidade. Por este motivo, a análise deste momento se torna justificável, pois é um momento que pode levar à uma ABI ou uma ABO.

A potência da fonte variou da seguinte forma para os diferentes métodos e parâmetros:

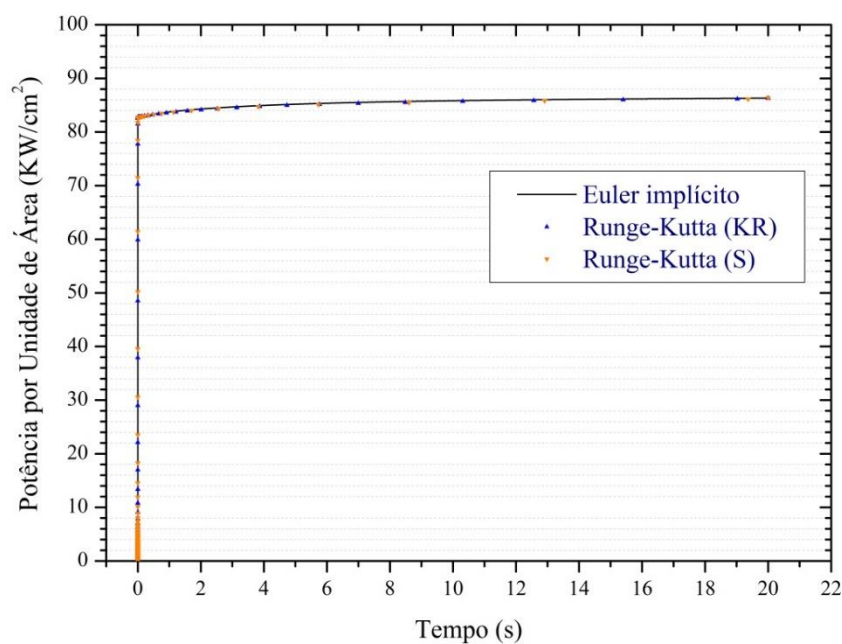


Figura 44 - Variação Potência start da fonte

Nota-se que para este caso não foi utilizado o conceito de potência relativa, pois como o ponto de partida seria o momento de fluxo nulo, não seria possível aplicar tal valor ao denominador da fração para a realização do cálculo da potência relativa.

Assim, logo após o início do funcionamento da fonte, os seguintes fluxos neutrônicos no reator foram obtidos:

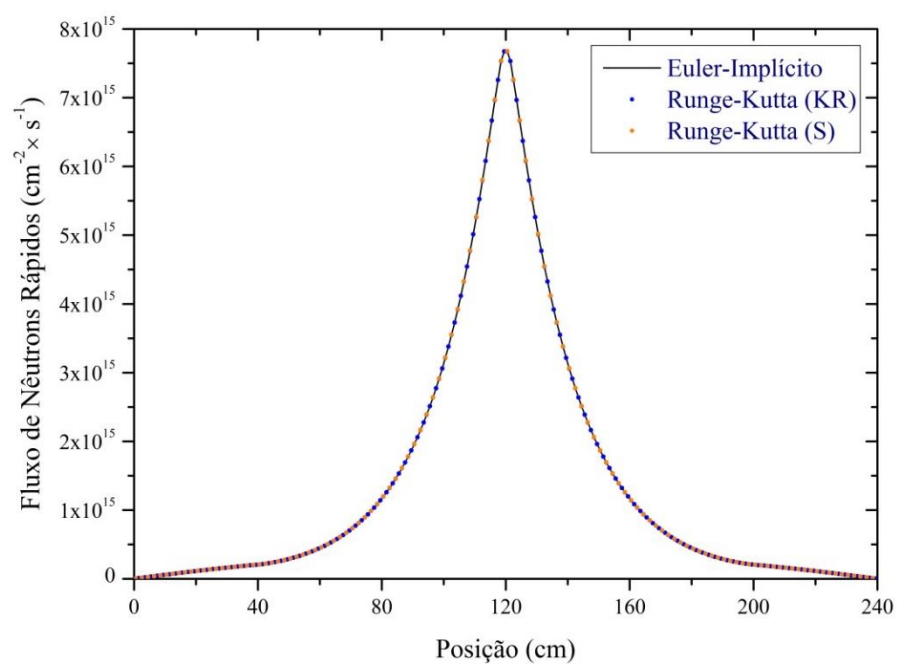


Figura 45 - Fluxo de Nêutrons Rápidos para o start da fonte

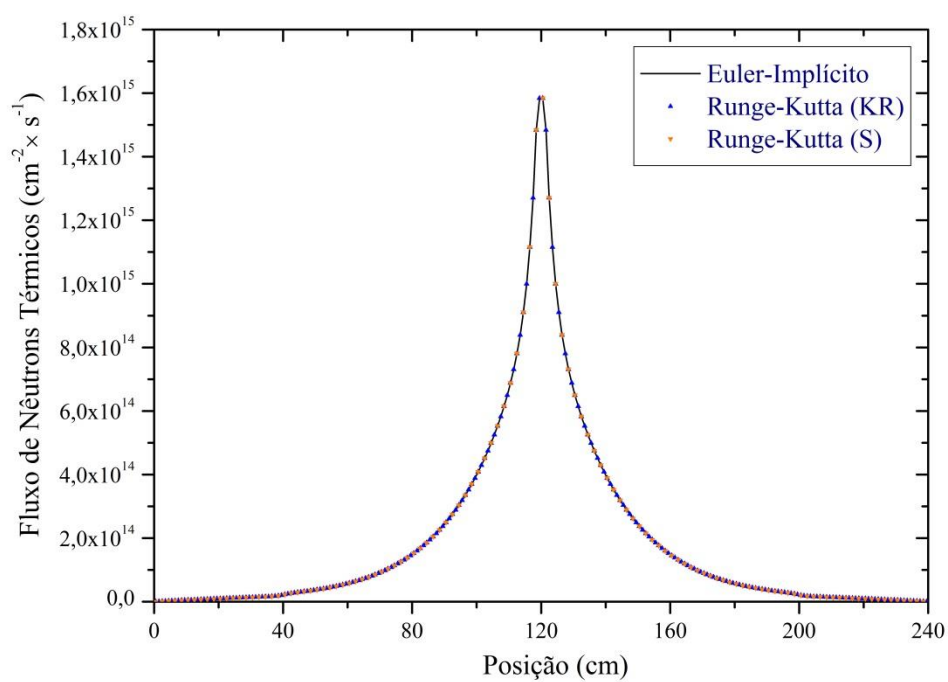


Figura 46 - Fluxo de Nêutrons Térmicos para o start da fonte

Na tabela 7, são listados os tempos de CPU obtidos em cada caso simulado:

Tabela 3 - Tempo de Processamento - BSS6 – ABI, ABO e Start da Fonte.

Tempo de Processamento (s)			
Método	BSS6 - ABI	BSS6 - ABO	BSS6 - Start
Euler Implícito	91,23	41,20	73,13
Runge-Kutta (KR)	126,97	50,41	42,97
Runge-Kutta (S)	68,72	32,68	66,72

A partir da tabela, observa-se que o Método de Runge-Kutta com os parâmetros de Shampine apresentou um menor tempo de processamento nos três casos simulados quando comparado com o de Euler.

5.3 Análise de erro

Em uma primeira análise, percebe-se, sem dificuldades, que o método de Runge-Kutta fornece resultados muito próximos aos obtidos pelo método de Euler implícito, independente do parâmetro ser de Kaps-Rentrop ou Shampine. Realizando o cálculo do erro percentual relativo para cada ponto, nota-se que as simulações feitas possuem grande exatidão, quando comparadas ao método implícito.

Para o caso BSS-6-A1, a medida com o maior valor para o erro relativo percentual usando os parâmetros de Kaps-Rentrop foi de 0,163%, obtida para $t=4s$ no grupo térmico. Utilizando os parâmetros de Shampine, o maior erro relativo percentual foi de 0,182% para $t=1s$, no grupo térmico.

Já para o caso BSS-6-A2, a medida com o maior valor de erro relativo percentual usando os parâmetros de Kaps-Rentrop foi de 0,524% para $t=1s$ no grupo térmico, enquanto para os parâmetros de Shampine foi de 0,8% também $t=1s$, no grupo térmico.

Para o caso ABI, a medida com o maior valor para o erro relativo percentual usando os parâmetros de Kaps-Rentrop foi de 0,072%, obtida no instante final do transiente no grupo térmico. Utilizando os parâmetros de Shampine o maior erro relativo percentual foi de 0,093% relativo ao início do transiente, no grupo rápido.

Para o caso ABO, a medida com o maior valor para o erro relativo percentual usando os parâmetros de Kaps-Rentrop foi de 0,019%, obtida para o período inicial do transiente no grupo térmico. Utilizando os parâmetros de Shampine o maior erro relativo percentual foi de 0,093%, relativo ao período inicial do transiente, no grupo rápido.

Para o caso Start, a medida com o maior valor para o erro relativo percentual usando os parâmetros de Kaps-Rentrop foi de 0,163%, obtida no grupo rápido. Utilizando os parâmetros de Shampine o maior erro relativo percentual foi de 0,189%, no grupo térmico. Os valores para os maiores erros obtidos foram sintetizados nas tabelas a seguir:

Tabela 4 - Erros Relativos máximos para Kaps-Rentrop A1

Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop A1 T = 1s		Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop A1 T = 2s		Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop A1 T = 3s		Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop A1 T = 4s	
Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico
0,117%	0,121%	0,022%	0,024%	0,060%	0,062%	0,162%	0,1633%

Tabela 5 - Erros Relativos máximos para Shampine A1

Erro Relativo Máximo Shampine A1 T = 1s		Erro Relativo Máximo Shampine A1 T = 2s		Erro Relativo Máximo Shampine A1 T = 3s		Erro Relativo Máximo Shampine A1 T = 4s	
Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico
0,17614%	0,182%	0,042%	0,041%	0,126%	0,128%	0,162%	0,163%

Tabela 6 - Erros Relativos máximos para Kaps-Rentrop A2

Tabela 7 - Erro Relativo Máximo para Kaps-Rentrop A2		Erro Relativo Máximo para Kaps-Rentrop A2		Erro Relativo Máximo para Kaps-Rentrop A2		Erro Relativo Máximo para Kaps-Rentrop A2	
T = 1s		T = 2s		T = 3s		T = 4s	
Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico
0,519%	0,524%	0,033%	0,035%	0,333%	0,336%	0,488%	0,491%

Erro Relativo Máximo Shampine A2		Erro Relativo Máximo Shampine A2		Erro Relativo Máximo Shampine A2		Erro Relativo Máximo Shampine A2	
T = 1 s		T = 2 s		T = 3 s		T = 4 s	
Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico
0,176%	0,182%	0,042%	0,041%	0,126%	0,128%	0,162%	0,163%

Tabela 8 - Erros Relativos máximos para ABI - Kaps-Rentrop e Shampine

Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop ABI INICIAL		Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop ABI FINAL		Erro Relativo Máximo Shampine ABI INICIAL		Erro Relativo Máximo Shampine ABI FINAL	
Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico
0,019%	0,019%	0,067%	0,072%	0,093%	0,008%	0,079%	0,081%

Tabela 9 - Erros Relativos máximos para ABO - Kaps-Rentrop e Shampine

Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop ABO INICIAL		Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop ABO FINAL		Erro Relativo Máximo Shampine ABO INICIAL		Erro Relativo Máximo Shampine ABO FINAL	
Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico	Rápido	Térmico
0,019%	0,019%	0,012%	0,012%	0,093%	0,008%	0,044%	0,044%

Tabela 10 - Erros Relativos Máximos para o START no tempo 10s

Erro Relativo Máximo Kaps-Rentrop START T= 10s		Erro Relativo Máximo Shampine START T= 10s	
Rápido	Térmico	Rápido	Térmico
0,163%	0,163%	0,189%	0,189%

6 CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Feita a discretização por diferenças finitas no esquema centrado na malha, da resolução do problema de autovalor, adicionando o termo de fonte externa, e por fim, das equações da cinética espacial, foi possível desenvolver um código em FORTRAN capaz de simular transientes em sistemas subcríticos no caso 1D tipo Slab. A partir dos dados obtidos por meio do programa de autovalor, foi possível realizar simulações para o caso das equações de cinética espacial.

Primeiramente, um código utilizando o método de Euler implícito foi desenvolvido para servir de referência. Para este caso, a parte temporal da equação foi tratada com passo fixo no tempo, ou seja, o valor de Δt para cada passo é idêntico, tanto para momentos de grandes variações de uma determinada medida (Fluxo, por exemplo) quanto para períodos com pouca ou nenhuma variação.

Posteriormente, foi desenvolvido um código que pudesse controlar automaticamente o passo no tempo, esperando tornar o tempo de processamento mais curto (SUTTON e AVILES, 1996). Esse código se baseou no método de Runge-Kutta através de um dos parâmetros de Kaps Rentrop e outro de Shampine para que fosse realizada uma comparação entre eles. Cabe lembrar que o método de Runge-Kutta também é implícito, assim como o de Euler.

Após o desenvolvimento do código, fez-se necessário realizar a sua validação. Para isso, foi utilizado o núcleo de reator padrão *ANL Benchmark problem* BSS-6-A1 e BSS-6-A2. Para que fosse possível ter uma referência de comparação, os mesmos transientes no Benchmark foram simulados utilizando-se do método de Euler implícito.

De acordo com os resultados obtidos pela simulação através do método de Runge-Kutta (RK-KP e RK-S), foi verificado que o código funciona corretamente com erros relativos percentuais inferiores a 1%. Além disso, com exceção do caso 1 (BSS-6-A1), o tempo de processamento das simulações dos transientes

de validação foram consideravelmente mais velozes para os parâmetros de Shampine.

Finalmente, feita a validação, foi possível realizar a simulação de transientes de relevância em sistemas subcríticos, tais como ABI, ABO e Start da Fonte. Mais uma vez, quando comparados à referência do método implícito, os métodos de Runge-Kutta apresentaram bons resultados.

Pode-se concluir, portanto, que a metodologia aplicada no presente trabalho foi eficaz e que o método de Runge-Kutta funciona de forma aceitável no cálculo de transientes, apresentando tempos de processamento inferiores a métodos como o de Euler implícito. A economia no tempo de processamento pode ser crucial para simulações de transientes em reatores com geometrias mais complexas.

Diante de uma perspectiva de estudos futuros, podemos estender esse cálculo para mais de uma dimensão e alterar a geometria do reator. Um passo futuro também engloba desenvolver uma interface amigável para a inserção dos parâmetros necessários na realização da simulação, já que através dela é possível que a ferramenta seja acessível para um número maior de usuários.

7 APÊNDICE

7.1 O BSS6 Benchmark

Na presente seção, será apresentado o Benchmark, que é um núcleo padrão de reator que foi utilizado para as simulações deste trabalho.

A geometria do ANL Benchmark problem BSS-6-A2 (NAGAYA e KOBAYASHI, 1995) é um núcleo de reator padrão unidimensional de placas, como descrito na figura que segue.

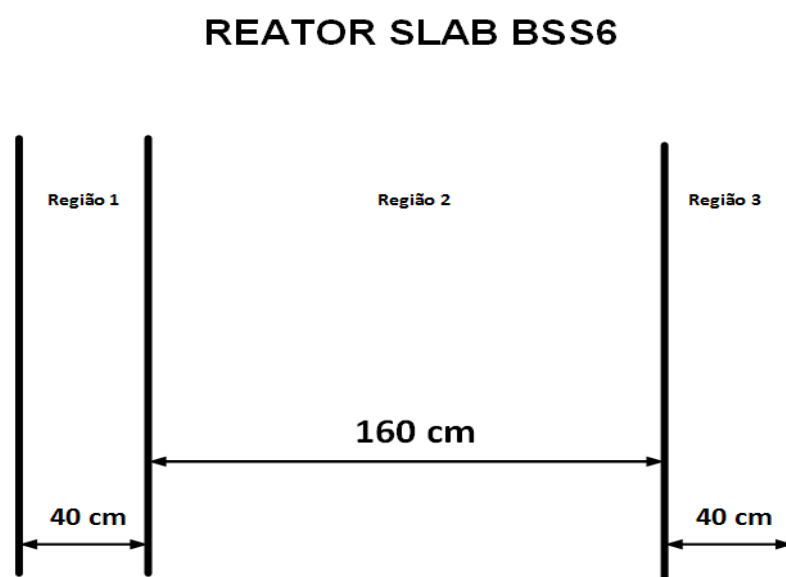


Figura 47 - Geometria do ANL-BSS-6 benchmark problem

O Benchmark emprega como condição de contorno o fluxo de nêutrons nulo nas extremidades. Os dados para coeficiente de difusão, parâmetros nucleares, velocidades dos grupos e as constantes para os nêutrons retardados, serão apresentados nas tabelas a seguir:

Constante	Região 1 e 3	Região 2
$D_1(cm)$	1,5	1,0
$D_2(cm)$	0,5	0,5
$\Sigma_{R1}(cm^{-1})$	0,026	0,02
$\Sigma_{R2}(cm^{-1})$	0,18	0,08
$\Sigma_{s12}(cm^{-1})$	0,015	0,01
$\nu\Sigma_{f1}(cm^{-1})$	0,01	0,005
$\nu\Sigma_{f2}(cm^{-1})$	0,2	0,099

Tabela 11 - Parâmetros Nucleares

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

Tabela 12 - Constante dos Nêutrons Retardados

Constante	Região 1 e 3	Região 2
$v_1(cm/s)$	1×10^7	1×10^7
$v_2(cm/s)$	3×10^5	3×10^5

Tabela 13 - Velocidade dos Grupos

Os dados apresentados nas tabelas 8 a 10 foram utilizados no código de cinética, resolvendo as equações da cinética espacial, simulando assim um núcleo de reator.

8 REFERÊNCIAS

- ABDERRAHIM, H. A. et al. MYRRHA: A multipurpose accelerator driven system for reserach & development. **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, 2001. 487-494.
- ALVIM, A. C. M. **Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear**. Curitiba: Editora Certa, 2007.
- AVILES, B. N. Development of a variable Time-step algorithms in Spatial Kinetics Calculations. **Transactions of the American Nuclear Society**, 68, 1993. 425-427.
- DE LIMA, Z. R. Aplicação do Método dos Pseudo-Harmônicos à Cinética Multidimensional. **Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE**, Rio de Janeiro, 2005.
- DORING, M. G.; KALKKUHL, J. C. Subspace iteration for Nonsymmetric Eigenvalue Problems Applied to the λ -Eigenvalue Problem. **Nuclear Science and Engineering**, 115, 1993. 244-252.
- DUDERSTADT, J. J.; HAMILTON, L. J. **Nuclear Reactor Analysis**. [S.I.]: John Wiley & Sons, Inc., 1976.
- FIGUEIRA, A. J. Cinética espacial para modelar transientes em reatores ADS. **Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE**, Rio de Janeiro, Setembro 2015.
- FORTUNA, A. D. O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos - Conceitos Básicos e Aplicações**. São Paulo: Edusp, 2000.
- GINESTAR, D. et al. High Order Backward Discretization Of The Neutron Diffusion Equation. **Ann. Nucl. Energy**, 25, 1998. 47-64.
- HÉBERT, A. Development of the nodal collocation method for solving the neutron diffusion equations. **Annals of Nuclear Energy**, 1987. 527-541.
- HENRY, A. F. **Nuclear-Reactor Analysis**. Cambridge: MIT Press, 1975.
- KAPS, P.; RENTROP, P. Generalized Runge-Kutta Methods of Order Four with stepsize control for stiff ordinary differential Equations. **Numerische Mathematik**, 33, 1979. 55-68.
- NAGAYA, Y.; KOBAYASHI, K. Solution of 1-D multi-group time-dependent diffusion equations using the coupled reactors theory. **Annals of Nuclear Energy**, 22, 1995. 421-440.

NAKAMURA, S. **Computational Methods in Engineering and Science**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 1977.

OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY. **Accelerator-driven Systems (ADS) and Fast Reactors (FR) in Advanced Nuclear Fuel Cycles**. [S.l.]: [s.n.], 2002. Disponível em: <<http://www.nea.fr/html/ndd/reports/2002/nea3109-ads.pdf>>. Acesso em: 29 Janeiro 2017.

PRESS, H. W. et al. **Numerical Recipes in Fortran 77**. 2^a. ed. Nova Iorque: Cambridge University Press, v. 1, 1992.

SANTOS, R. S. D. **STARTUP TRANSIENTS IN ACCELERATOR DRIVEN SYSTEMS USING CINESP-ADS CODE**. 2009 International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2009. [S.l.]: ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE ENERGIA NUCLEAR - ABEN.

SCK-CEN. MYRRHA. www.myrrha.sckcen.be, 2017. Disponível em: <<http://myrrha.sckcen.be/en>>. Acesso em: janeiro 2017.

SHAMPINE, L. F. **ACM transactions on Mathematical Software**. [S.l.]: ACM, v. 8, 1982. 93-113 p.

STACEY JR, W. M. **Benchmark Problem Book**. [S.l.]: National Energy Software Center, v. ANL-7416-Supplement 3, 1985.

STACEY, W. M. **Space-Time Nuclear Reactor Theory**. Nova Iorque: Academic Press, 1970.

SUTTON, T. M.; AVILES, B. N. Diffusion Theory Methods for Spatial Kinetics Calculations. **Progress in Nuclear Energy**, 30, 1996. 119-182.

TAIWO, T. A. et al. Time-step selection considerations in the analysis of reactor transients with DIF3D-K. **Transactions of the American Nuclear Society**, 1993. 429-430.

THORIUM REPORT COMMITTEE. **Thorium as an energy source**. [S.l.]: Thorium Report Committee, 2008. ISBN 978-82-7017-693-9. Disponível em: <<https://www.regjeringen.no/globalassets/upload/OED/Rapporter/ThoriumReport2008.pdf>>. Acesso em: janeiro 2017.

VERDÚ, G. et al. A consistent Multidimensional Nodal Method for Transient Calculations. **Ann. Nucl. Energy**, 1995. 395-410.

WEINBERG, A. M.; WINGER, E. P. **The Physical Theory of Neutron Chain Reactors**. Chicago: Chicago Press, 1958.

WORLD NUCLEAR ASSOCIATION. Accelerator-driven Nuclear Energy. www.world-nuclear.org, março 2016. Disponível em: <<http://www.world-nuclear.org/information-library.aspx>>. Acesso em: 26 Janeiro 2017.