

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

**DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE CRITICALIDADE, FLUXO E
POTÊNCIA EM PLACAS PLANAS PELO MÉTODO LTS_N**

por

Julio Cesar dos Santos

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, 24 de Setembro de 2002

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE CRITICALIDADE, FLUXO E POTÊNCIA EM PLACAS PLANAS PELO MÉTODO LTS_N

por

Julio Cesar dos Santos

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Volnei Borges

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Marco Tullio M. B. Vilhena (PROMEC-UFRGS)

Prof. Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite (CNEN)

Prof. Dr. Jorge R. S. Zabadal (PROMEC-UFRGS)

Prof. Dr. Alberto Tamagna
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 24 de Setembro de 2002

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao amigo e professor orientador Volnei Borges pela oportunidade de realização deste trabalho e pela forma tranqüila e segura de sua orientação.

Aos colegas André Shemes, Charles Rech e Frederico Sporket cujas amizades enriqueceram-me tanto na formação pessoal quanto acadêmica e aos demais colegas que de forma direta ou indireta contribuíram na execução deste trabalho.

À CAPES, pelo suporte financeiro e ao PROMEC, representado em seu corpo de funcionários e docentes.

Especialmente à generosidade da minha família e esposa Carin Strassburger.

RESUMO

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE CRITICALIDADE, FLUXO E POTÊNCIA EM PLACAS PLANAS PELO MÉTODO LTS_N

O objetivo deste trabalho consiste em aplicar o método LTS_N em cálculos de parâmetros críticos como K_{eff} , espessura e concentração atômica e obtenção do fluxo escalar, da potência específica e do enriquecimento do combustível em placa plana homogênea e heterogênea, considerando modelo multigrupo e em diversas ordens de quadraturas. O método LTS_N consiste na aplicação da transformada de Laplace em um conjunto de equações de ordenadas discretas gerado pela aproximação S_N , resultando em um sistema de equações algébricas simbólicas dependentes do parâmetro complexo s e reconstrução dos fluxos angulares pela técnica de expansão de Heaviside. A aplicação do método LTS_N reduz a solução de um problema de autovalor, a solução de uma equação transcendental, possibilitando a obtenção de parâmetros críticos. Simulações numéricas são apresentadas.

ABSTRACT

DETERMINATION OF CRITICALITY PARAMETERS, FLUX AND POWER IN A PLANE SLAB BY THE METHOD LTS_N

The aim of this work consists of applying the method LTS_N in calculations of critical parameters as neutron effective multiplication, thickness and atomic concentration and attainment of the scale flux, of the power specific and the enrichment of the fuel in homogeneous and heterogeneous slab, considering model multigroup and in diverse orders of quadratures. Method LTS_N consists of the application of the transformed of Laplace in a group of equations of discrete ordinates generated by the approach S_N , resulting in a system of equations symbolic algebraic dependents of the complex parameter s and reconstruction of the angular fluxes for the technique of expansion of Heaviside. The application of the LTS_N method reduces the solution of an eigenvalue problem, the solution of a transcendental equation, making possible the attainment of critical parameters. Numerical simulations are presented.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	O MÉTODO LTS_N	3
2.1	Equação de Transporte	3
2.2	Método LTS_N	5
2.3	Equação de Transporte em Multirregiões e Multigrupos	13
2.4	Inversão da Matriz A_N por Diagonalização	17
2.5	Cálculo de Criticalidade pelo LTS_N	19
3	MÉTODO LTS_N APLICADO A PROBLEMAS DE CRITICALIDADE .	21
3.1	Determinação da Equação Transcendental	21
3.2	Determinação da Espessura	23
3.3	Determinação do Fator de Multiplicação de Nêutrons K_{eff}	24
3.4	Determinação da Concentração Atômica	25
3.5	Determinação do Enriquecimento (Density Number)	25
3.6	Determinação do Fluxo Escalar	27
3.7	Determinação da Potência	28
4	RESULTADOS NUMÉRICOS E DISCUSSÕES	29
4.1	Cálculo do Fator de Multiplicação Efetivo, Cálculo de Espessura, Cálculo da Concentração Atômica, do Enriquecimento Atômico e da Potência Específica em Placa Homogênea com um Grupo de Energia	30
4.2	Cálculo do Fator de Multiplicação Efetivo, Cálculo de Espessura, Cálculo da Concentração Atômica, do Enriquecimento Atômico e da Potência Específica em Placa Heterogênea com Multigrupos de Energia	38

5 CONCLUSÃO	68
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	69

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

M_{GN}	Matriz (sI-A) gerada pelo LTSN
Ee_x	Componente esférico-espacial no eixo cartesiano x
Ee_y	Componente esférico-espacial no eixo cartesiano y
Ee_z	Componente esférico-espacial no eixo cartesiano z
A	Matriz seção de choque diferencial resultante da aproximação multi-grupo
A_v	Número de Avogadro $[\frac{0,60225 \times 10^{24} \text{moléculas}}{g_{mol}}]$
D	Matriz diagonal de autovalores
E	Energia do nêutron
f	Fração mássica de combustível no material combustível
$f(E)$	Fluxo angular incidente para direções positivas ($\mu > 0$) e energia E
G	Número de grupos de energia
g	Número do grupo de energia
$g(E)$	Fluxo angular incidente para direções negativas ($\mu < 0$) e energia E
I	Matriz identidade
i_f	Número de átomos por molécula de combustível
L	Grau de anisotropia
m_{ff}	Massa molecular do combustível físsil
m_{nf}	Massa molecular do combustível não-físsil
m_{O_2}	Massa molecular do oxigênio
N	Ordem de quadratura de Gauss
n_{ff}	Concentração Atômica $[\frac{n_{\text{núcleos}}}{cm^3}]$
P	Potência específica $[\frac{watt}{cm^3}]$

P_l	Polinômio de Legendre de ordem l
$Q(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega})$	Fonte de nêutrons $[\frac{nêutrons}{cm^2 \cdot energia \cdot esteroradiano}]$
$Q_f(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega})$	Fonte de nêutrons devido às fissões $[\frac{nêutrons}{cm^2 \cdot energia \cdot esteroradiano}]$
r	Vetor posição
r_a	Enriquecimento
t	Intervalo de tempo
V	Matriz de autovetores
v	Velocidade do nêutron no meio
w_i	Pesos da quadratura de Gauss
x	Posição do nêutron $[cm]$
x_1	Espessura da placa $[cm]$
	<i>Letras Gregas</i>
β_l	Coefficientes
χ	Espectro de fissão
μ	Direção cosseno de propagação do nêutron
μ_0	Cosseno do ângulo de espalhamento
μ_i	Raízes simétricas do polinômio de Legendre de grau N
∇	Operador nabla
ν	Número médio de nêutrons emitidos por fissão
Ω	Ângulo sólido
Φ	Fluxo escalar $[\frac{nêutrons}{cm^2 \cdot s}]$
$\Psi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega})$	Densidade do fluxo nêutrons $[\frac{nêutrons}{cm^3 \cdot s \cdot energia \cdot esteroradiano}]$
ρ_{fm}	Densidade do combustível físsil $[\frac{g_{mol}}{cm^3}]$
Σ_f	Seção de choque macroscópica de fissão $[\frac{1}{cm}]$
σ_f	Seção de choque microscópica de fissão $[barn]$
Σ_s	Seção de choque de espalhamento $[\frac{1}{cm}]$
Σ_t	Seção de choque macroscópica total $[\frac{1}{cm}]$

θ	Ângulo de espalhamento
φ	Ângulo azimutal
ξ	Variável de integração

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1	Posição e direção das variáveis que definem o estado de uma partícula.	4
2.2	Representação gráfica de uma placa heterogênea de R regiões.	13
2.3	Representação gráfica de uma placa heterogênea de R regiões com translação na variável espacial.	15
4.1	Representação gráfica de uma placa homogênea e condições de contorno do tipo vácuo.	30
4.2	Gráfico do K_{eff} para placa homogênea com espessura de 10 cm - Problema 4.1a	32
4.3	Gráfico da espessura de uma placa homogênea com o $K_{eff} = 0,9534629$ - Problema 4.1b	34
4.4	Gráfico do fluxo escalar Φ e da potência específica P normalizados com o $K_{eff} = 0,9534629$ e espessura de 10 cm - Problema 4.1d	37
4.5	Representação gráfica de uma placa heterogênea e condições de contorno do tipo vácuo.	38
4.6	Gráfico do K_{eff} com duas regiões de espessura de 5 cm - Problema 4.2.1a	41
4.7	Gráfico da espessura na região 2 com o $K_{eff} = 0,37790130$ - Problema 4.2.1b	43
4.8	Gráfico dos fluxos escalares Φ e das potências específicas P normalizados com o $K_{eff} = 0,37790130$ e espessura de 10 cm - Problema 4.2.1d	46
4.9	Representação gráfica de uma placa heterogênea de 5 regiões.	47
4.10	Gráfico do K_{eff} com 5 regiões e 4 grupos - Problema 4.2.2a	50
4.11	Gráfico dos fluxos escalares Φ e das potências específicas P normalizados com o $K_{eff} = 1,18459959$ - Problema 4.2.2b	54
4.12	Representação gráfica de uma placa heterogênea de 3 regiões.	55
4.13	Gráfico do K_{eff} com 3 regiões e 10 grupos - Problema 4.2.3a	60

4.14 Gráfico dos fluxos escalares Φ normalizados com o $K_{eff} = 1,07537222$ - Problema 4.2.3b	66
4.15 Gráfico das potências específicas P normalizadas com o $K_{eff} = 1,07537222$ - Problema 4.2.3b	67

ÍNDICE DE TABELAS

4.1	Dados de Entrada - Problema 4.1a	31
4.2	Resultado K_{eff} obtido pelo método LTS_N para espessura da placa de 10 cm - Problema 4.1a	31
4.3	Resultado da espessura da placa, obtida com método LTS_N e considerando $K_{eff} = 0,9534629$ - Probl. 4.1b	33
4.4	Tabela de propriedades do combustível nuclear de UO_2	35
4.5	Dados de entrada complementares - Problema 4.1d	36
4.6	Resultado LTS_N do fluxo escalar e da potência específica normalizados na espessura de 10 cm	36
4.7	Parâmetros de entrada para o Problema 4.2.1a	39
4.8	Resultado de K_{eff} para uma placa heterogênea com espessura = 10 cm - Problema 4.2.1a	40
4.9	Resultado para espessura da região 2, obtida pelo método LTS_N , para $K_{eff} =$ $0,37790130$ - Problema 4.2.1b	42
4.10	Resultado LTS_N da potência específica e do fluxo escalar normalizados da placa plana Heterogênea, composta por duas regiões e dois grupos de energia	45
4.11	Parâmetros de entrada para o Problema 4.2.2a	47
4.12	Resultado de K_{eff} para uma placa heterogênea com 5 regiões - Problema 4.2.2a	49
4.13	Resultado LTS_N dos fluxos escalares na placa de 5 regiões e 4 grupos de energias	51
4.14	Resultado LTS_N das potências específicas na placa de 5 regiões e 4 grupos de energias	52
4.15	Parâmetros de entrada para o problema 4.2.3a	55
4.16	Resultado de K_{eff} para uma placa heterogênea com 3 regiões - Problema 4.2.3a	59
4.17	Resultado LTS_N dos fluxos escalares na placa de 3 regiões e 10 grupos de energias	61

4.18 Resultado LTS_N das potências específicas na placa de 3 Regiões e 10 grupos de energias.....	63
4.19 Resultado LTS_N dos fluxos escalares e das potências totais na placa de 3 Regiões.	65

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A equação de transporte descreve o comportamento médio de uma população de partículas através de meios materiais. É uma ferramenta matemática fundamental para a análise quantitativa de vários fenômenos físicos. As partículas podem ser compostas por nêutrons, fótons, íons e moléculas de gases, sendo que, devido a este fato, a equação do transporte é utilizada em diversas áreas, sendo aplicada no projeto de reatores nucleares, blindagens de radiações, dosimetria das radiações, transferência radiativa em nuvens, difusão da luz em atmosferas, propagação do som, difusão de moléculas nos gases e na física do plasma (teoria cinética do plasma), entre outros[Duderstadt e Martin, 1979]. A equação de transporte foi proposta por Boltzmann em 1872 na forma íntegro-diferencial não linearizada, sendo que Case [Case e Zweifel, 1967] apresenta uma solução analítica para uma equação de transporte linearizada reproduzindo o comportamento de partículas sem carga (fótons e nêutrons) em problemas unidimensionais. Soluções para a equação de transporte são encontradas na literatura, usando métodos probabilísticos, como Monte Carlo[Spanier e Gelbard, 1969] e determinísticos, entre os quais se destacam o método de multigrupo[Sensonske e Glasstone, 1967] que leva em conta a dependência energética, o método de expansão em harmônicos esféricos P_N e DP_N [Bell e Glasstone, 1970][Duderstadt e Martin, 1979] que considera a dependência angular do fluxo, o método das ordenadas discretas S_N [Duderstadt e Martin, 1979] que consiste em discretizar o termo integral da equação de transporte por fórmulas de quadratura, o método dos elementos finitos[Duderstadt e Martin, 1979], método dos momentos e método F_N [Siewert e Benoist, 1979] onde a aplicação de uma transformada integral finita e a ortogonalidade das funções generalizadas de Case sobre a equação estabelecem um sistema linear, que permite o cálculo do fluxo na fronteira. No caso do método das ordenadas dis-

cretas, novas metodologias surgiram no início da década de 90, que resolvem analiticamente as aproximações S_N da equação de transporte, como os métodos DGFS $_N$ (Spectral Green's Function)[Barros e Larsen, 1990] que utiliza um processo numérico livre de erro de truncamento espacial sobre um domínio finito, o método LTS $_N$ que consiste na aplicação da transformada de Laplace no sistema de equações diferenciais ordinárias gerado pela aproximação S_N , resultando em um sistema de equações algébricas simbólicas dependentes do parâmetro complexo s ; este sistema é resolvido e, reconstrói-se a solução pela inversa da transformada de Laplace usando o método de diagonalização e a técnica de expansão de Heaviside. Esse método foi utilizado para modelo de um grupo de energia[Barichello e Vilhena, 1993], multigrupo[Vilhena e Barichello, 1995], espalhamento isotrópico e anisotrópico[Oliveira, 1993], meio homogêneo e heterogêneo, criticalidade[Batistela, 1997][Batistela e Borges, 1997][Batistela e Borges, 1998], problemas inversos[Barichello e Vilhena, 1993], problemas estacionários em uma e duas dimensões, com domínios convexos bidimensionais[Zabadal e Barichello, 1993][Zabadal, 1994][Zabadal e Barichello, 1995][Zabadal et al., 1995].

Dando continuidade aos trabalhos desenvolvidos, foi feita esta dissertação cujo objetivo consiste em aplicar o método LTS $_N$ em cálculos de parâmetros críticos como K_{eff} , espessura e concentração atômica, além do fluxo escalar de nêutrons e da potência específica em placas planas. Este trabalho está dividido em 5 capítulos. O capítulo 2 refere-se à equação de transporte aplicada a nêutrons com a formulação do método LTS $_N$, o modelo de multigrupo de energia, o modelo de multirregiões, a forma de inversão da matriz resultante da aplicação do LTS $_N$ e o cálculo da criticalidade pelo método LTS $_N$. No capítulo 3, descreve-se o método LTS $_N$ para determinação da equação transcendental, da espessura crítica e do fator de multiplicação de nêutrons resultante da aplicação das condições de contorno nos casos de multigrupos e multirregião em placas planas, assim como a descrição do método utilizado na determinação do parâmetro desejado de concentração atômica, enriquecimento, fluxo escalar e da potência específica. No capítulo 4 são apresentados os resultados numéricos na forma de tabelas, assim como os gráficos obtidos dos resultados encontrados e no capítulo 5 relata-se a conclusão e comentários finais.

CAPÍTULO 2

O MÉTODO LTS_N

2.1 Equação de Transporte

A derivação da equação de transporte é baseada no conceito de conservação de partículas em um elemento diferencial $dVdEdr$, foi proposta por Boltzmann no estudo da teoria cinética de gases na mecânica estatística. Essa equação quando aplicada no projeto de reatores nucleares, toma a seguinte forma,[Henry, 1975]

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \hat{\Omega} \cdot \nabla \Psi + \Sigma_t(r, E) \Psi = \int_0^{\infty} dE' \int d\hat{\Omega}' [\Sigma_s(r, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})] \Psi(r, \hat{\Omega}', E', t) + Q \quad (2.1)$$

onde $\Psi = \Psi(r, E, \hat{\Omega}, t)$ é a densidade do fluxo de nêutrons, $\hat{\Omega}$ é o vetor direção do nêutron (ângulo sólido), com a mesma direção do vetor velocidade do nêutron v , sendo que este vetor velocidade unitário pode ser representado em coordenadas esférico-espaciais(θ, Φ), como mostrado na Figura 2.1. Dessa forma, temos:

$$\hat{\Omega} = \frac{v}{|v|} = \hat{e}_x \sin \theta \cos \Phi + \hat{e}_y \sin \theta \sin \Phi + \hat{e}_z \cos \theta \quad (2.2)$$

A função $\Sigma_t(r, E)$ é a seção de choque macroscópica total dos núcleos contidos em uma unidade de volume, sendo também denominada de densidade de probabilidade por unidade de percurso para que o nêutron de energia E interaja com o meio, na posição r por unidade de distância percorrida; $\Sigma_s(r, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})$ é a seção de choque macroscópica

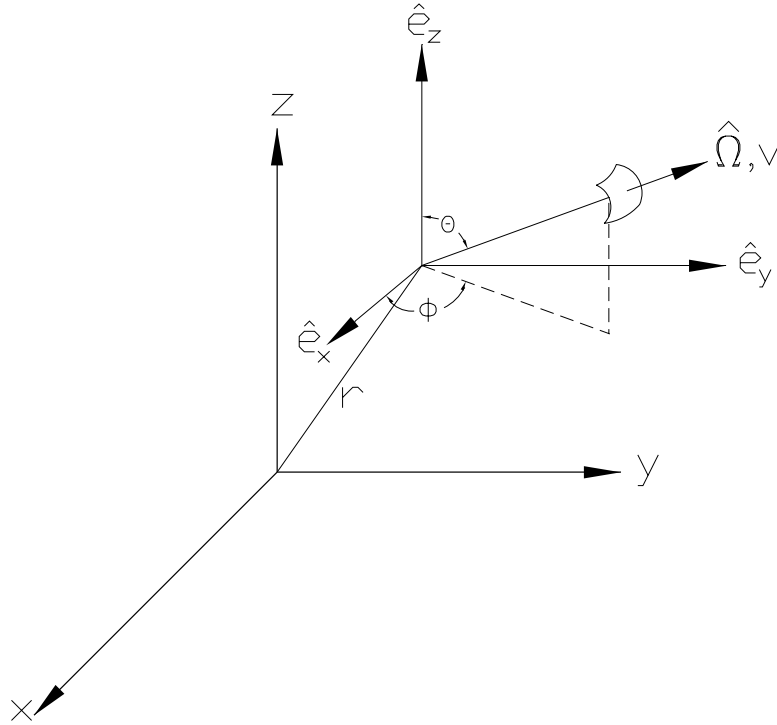


Figura 2.1 – Posição e direção das variáveis que definem o estado de uma partícula.

de espalhamento que representa a probabilidade de que os nêutrons, após terem colidido, sejam espalhados com direção $d\hat{\Omega}$, em torno de $\hat{\Omega}$ e energia dE , em torno de E e por fim $Q = Q(r, E, \hat{\Omega}, t)$ é o termo de fonte. O termo de fonte devido a fissão é representado por

$$Q_f(r, \hat{\Omega}, E, t) = \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int d\hat{\Omega}' [\nu(E') \Sigma_f(r, E')] \Psi(r, E', \hat{\Omega}', t) \quad (2.3)$$

então, tem-se

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi + \hat{\Omega} \cdot \nabla \Psi + \Sigma_t \Psi = \\ & \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' [\chi(E) \nu(E') \Sigma_f(r, E') + \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})] \Psi(r, \hat{\Omega}', E', t) + \\ & Q(r, \hat{\Omega}, E, t) \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde o espectro de fissão em função da energia é representado pela função $\chi(E)$, também

denominada de densidade de probabilidade, de tal forma que

$$\int_0^{\infty} dE \chi(E) = 1 \quad (2.5)$$

e $\chi(E) dE d\Omega$ é a fração dos nêutrons resultantes destes processos de fissão com direção $d\hat{\Omega}$ em torno de $\hat{\Omega}$ e energia dE em torno de E . Considerando-se que estes nêutrons são emitidos isotropicamente, ou seja que não possuam memória da orientação dos nêutrons incidentes. A função $\nu(E)$ representa a fração média de nêutrons emitidos por fissão em função da energia dos nêutrons incidentes, verificando-se que aumenta linearmente com a energia. A função $\Sigma_f(r, E')$ representa a seção de choque macroscópica de fissão, sendo que também pode ser decomposta no produto $n_{ff} \sigma_f(r, E')$, onde n_{ff} representa a densidade ou concentração atômica e a função $\sigma_f(r, E')$ é a seção de choque microscópica de fissão.

2.2 Método LTS_N

A metodologia LTS_N consiste na aplicação da Transformada de Laplace no sistema de equações diferenciais ordinárias que resolve na forma analítica a aproximação S_N da equação de transporte. Para mostrar o uso desse método, considera-se a equação de transporte linear unidimensional com simetria azimutal em uma placa de geometria plana para o caso de espalhamento anisotrópico, em regime estacionário e sem a presença de fonte externa:

$$\begin{aligned} \mu \frac{d\Psi}{dx} + \Sigma_t \Psi = & \frac{\chi(E)}{2} \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 d\mu' dE' \nu(E') \Sigma_f(x, E') \Psi(x, \mu', E') + \\ & 2\pi \int_0^{\infty} \int_{-1}^1 d\mu' dE' \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu, E' \rightarrow E) \Psi(x, \mu', E') \end{aligned} \quad (2.6a)$$

sujeita às condições de contorno

$$\Psi(0, \mu, E) = f(\mu, E), \quad \mu > 0 \quad (2.6b)$$

$$\Psi(x_1, \mu, E) = g(\mu, E), \quad \mu < 0 \quad (2.6c)$$

sendo

$$\Psi = \Psi(x, \mu, E) \quad (2.7)$$

onde $\mu = \cos \theta$, é o co-seno do ângulo de espalhamento formado pela direção de movimento do nêutron com o eixo do sistema de coordenadas usado como referência, e $\int_{-1}^1 d\mu = \sum_{i=1}^n w_i = 2$ são os pesos normalizados

Verifica-se que $x \in [0, x_1]$ é uma variável espacial e $f(\mu)$ e $g(\mu)$ são os fluxos incidentes na fronteira do domínio (direções positivas e negativas, respectivamente).

Quando $\mu_0 = \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}'$, isto é $\mu_0 = \mu \cdot \mu'$, o termo $\Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu, E' \rightarrow E)$ denominado de kernel ou lei de espalhamento é geralmente aproximado por uma soma de polinômios de Legendre,

$$\Sigma_s(\mu) = \sum_{l=0}^L \left(\frac{\beta_l}{4\pi} \right) P_l(\cos \theta) \quad (2.8)$$

sendo que os coeficientes β_l são tabelados ($\beta_0 = 1$ e $|\beta_l| \leq 2l + 1$, com $l > 1$) e aplicando o teorema da adição para os polinômios de Legendre, na equação 2.6a, obtemos,

$$\Sigma_s(\mu' \rightarrow \mu) = \sum_{m=0}^M \sum_{l=m}^L \frac{\beta_l^m}{4\pi} \Sigma_{sl} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos(\varphi - \varphi') \quad (2.9)$$

onde φ é o ângulo azimutal, P_l^m são as funções associadas de Legendre, lembrando que,

$$\beta_l^m = \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \beta_l. \quad (2.10)$$

Para simetria azimutal,

$$P_l(\mu_0) = P_l(\mu) P_l(\mu') . \quad (2.11)$$

Fazendo estas aproximações, a equação 2.6a, torna-se

$$\begin{aligned} \mu \frac{d\Psi}{dx} + \Sigma_t \Psi &= \frac{\chi(E)}{2} \int_0^\infty \int_{-1}^1 d\mu' dE' \nu(E') \Sigma_f(x, E') \Psi(x, \mu', E') + \\ &\int_0^\infty dE' \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{2} \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu, E' \rightarrow E) P_l(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_l(\mu') \Psi(x, \mu', E') . \end{aligned} \quad (2.12)$$

Aplicando o método de ordenadas discretas no qual aproxima o termo integral pela discretização da variável angular μ , aproximando por uma fórmula de quadratura de Gauss-Legendre, tem-se

$$\int_{-1}^1 d\mu' P_l(\mu') \Psi(x, \mu', E') \cong \sum_{i=1}^N w_i \Psi(x, \mu_i, E') P_l(\mu_i) \quad (2.13)$$

onde w_i representa os pesos positivos da quadratura de Gauss-Legendre e, μ_i são as raízes simétricas do polinômio de Legendre de grau N , com N par e ordenadas de forma decrescente,

$$-1 < \mu_N < \dots < \mu_{\frac{N}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{N}{2}} < \dots < \mu_1 < 1 . \quad (2.14)$$

A aproximação S_N da equação 2.6a com a utilização dos pesos da quadratura de Gauss-Legendre com seus respectivas raízes do polinômio de Legendre de grau N é dada por

$$\begin{aligned} \mu_j \frac{d\Psi_j}{dx} + \Sigma_t \Psi_j &= \frac{\chi(E)}{2} \int_0^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(x, E') \sum_{i=1}^N w_i P_l(\mu_i) \Psi_i(x, \mu_i, E') + \\ &\int_0^\infty dE' \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)}{2} \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu, E' \rightarrow E) P_l(\mu_j) \sum_{i=1}^N w_i P_l(\mu_i) \Psi_i(x, \mu_i, E') \end{aligned} \quad (2.15)$$

com $j = 1, 2, \dots, N(\text{par})$, e as condições de contorno

$$\Psi_k(0, \mu_k, E) = f_k(E), \quad \mu_k > 0 \quad (2.16a)$$

$$\Psi_k(x_1, \mu_k, E) = g_k(E), \quad \mu_{k+\frac{N}{2}} < 0 \quad (2.16b)$$

com $k = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$, $\Psi_j = \Psi(x, \mu_j, E)$, os μ_k ordenados de forma decrescente e $\Psi_i(x, \mu_i, E')$ é o fluxo angular na direção discretizada μ_i acoplada pela seção de choque macroscópica de espalhamento.

Dividindo a equação 2.15 por μ_j , fazendo $L = 0$ e sabendo que $P_0(\mu) = 1$, obtém-se,

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_j}{dx} + \frac{\Sigma_t}{\mu_j} \Psi_j &= \frac{\chi(E)}{2\mu_j} \int_0^\infty dE' \nu(E') \Sigma_f(x, E') \sum_{i=1}^N w_i \Psi_i(x, \mu_i, E') + \\ \frac{1}{2\mu_j} \int_0^\infty dE' \Sigma_s(x, \mu' \rightarrow \mu, E' \rightarrow E) &\sum_{i=1}^N w_i \Psi_i(x, \mu_i, E') \end{aligned} \quad (2.17)$$

e discretizando em energia e em ângulo, resulta em

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_{g,j}(x)}{dx} + \frac{\Sigma_{tg}}{\mu_j} \Psi_{g,j}(x) &= \frac{\chi_g}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \nu_{g'} \Sigma_{fg'} \Psi_{g',i}(x) w_i + \\ \frac{1}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \Sigma_{sg' \rightarrow g} \Psi_{g',i}(x) &w_i \end{aligned} \quad (2.18)$$

sendo $\Psi_{g,j} = \Psi(x, \mu_j)$, com $g = 1, 2, \dots, G$, $i = 1, 2, \dots, N$ (par), $0 \leq x \leq x_1$, sem perda de generalidade, sujeito às condições de contorno

$$\Psi_{g,j}(0) = f_{g,j}, \quad \mu_j > 0 \quad (2.19a)$$

$$\Psi_{g,j}(x_1) = g_{g,j}, \quad \mu_j < 0. \quad (2.19b)$$

Reagrupando a equação 2.18, tem-se

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} \Psi_{g,j}(x) + \frac{\Sigma_{t_g}}{\mu_j} \Psi_{g,j}(x) - \frac{\chi_g}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \nu_g \Sigma_{f_{g'}} \Psi_{g',i}(x) w_i \\
& - \frac{1}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \Sigma_{s_{g' \rightarrow g}} \Psi_{g',i}(x) w_i - \frac{\chi_g}{2\mu_j} \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \nu_g \Sigma_{f_{g'}} \Psi_{g',i}(x) w_i \\
& - \frac{1}{2\mu_j} \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \Sigma_{s_{g' \rightarrow g}} \Psi_{g',i}(x) w_i = 0
\end{aligned} \tag{2.20}$$

colocando $\Psi(x)$ em evidência e reordenando, podemos reescrever na seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dx} \Psi_{g,j}(x) + \left[\frac{\Sigma_{t_g}}{\mu_j} - \frac{1}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \left(\Sigma_{s_{g' \rightarrow g}}(x) + \chi_g \nu_{g'} \Sigma_{f_{g'}} \right) w_i \right] \Psi_{g',i}(x) - \\
& \frac{1}{2\mu_j} \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \sum_{\substack{i=1 \\ k \neq j}}^N \left(\Sigma_{s_{g' \rightarrow g}} + \chi_g \nu_{g'} \Sigma_{f_{g'}} \right) \Psi_{g',i}(x) w_i = 0
\end{aligned} \tag{2.21}$$

colocando na forma matricial, tem-se

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} + A\Psi(x) = 0 \tag{2.22}$$

onde A é uma matriz de ordem $GN \times GN$ e

$$A_{g'g}(i,j) = \begin{cases} \frac{-\Sigma_{t_g}}{\mu_j} + \frac{w_i}{2\mu_j} \left(\Sigma_{s_{g' \rightarrow g}} + \chi_g \nu_{g'} \Sigma_{f_{g'}} \right) & \text{se } g'=g \text{ e } i=j \\ \frac{w_i}{2\mu_j} \left(\Sigma_{s_{g' \rightarrow g}} + \chi_g \nu_{g'} \Sigma_{f_{g'}} \right), & \text{nos demais casos.} \end{cases} \tag{2.23}$$

e

$$\Psi(x) = \begin{bmatrix} \Psi_{11}(x) \\ \vdots \\ \Psi_{1N}(x) \\ \vdots \\ \Psi_{G1}(x) \\ \vdots \\ \Psi_{GN}(x) \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

onde $\Psi(x)$ é o vetor coluna do fluxo angular.

Sabe-se que a solução da equação 2.22 é expressa como [Schilling e Lee, 1988]

$$\Psi(x) = e^{Ax}\Psi(0) + \int_0^x e^{A(x-\xi)} Q(\xi) d\xi \quad (2.25)$$

com $\Psi(0)$ sendo o fluxo angular em $x = 0$. Verifica-se que somente $\frac{N}{2}$ componentes do vetor $\Psi(0)$, correspondentes ao fluxo angular incidente no sistema, são conhecidas e aplicando a transformada de Laplace, na equação 2.22, obtemos,

$$s\bar{\Psi}(s) - \Psi(0) - A\bar{\Psi}(s) = 0. \quad (2.26)$$

Rescrevendo temos

$$(sI - A)\bar{\Psi}(s) = \Psi(0) \quad (2.27)$$

onde I é a matriz identidade de ordem GN .

Fazendo

$$\bar{M}_{GN}(s) = (sI - A), \quad (2.28)$$

então

$$\bar{B}(s) = \left(\bar{M}_{GN}(s) \right)^{-1} = \frac{\text{adj}(sI - A)}{\det(sI - A)} \quad (2.29)$$

sendo as matrizes de $i = 1, 2, \dots, N - 1$, [Barichello e Vilhena, 1993].

Os elementos da matriz $\bar{B}(s)$ são quocientes de polinômios em s , de maneira que a aplicação da técnica de expansão de Heaviside para a inversa da transformada de Laplace, resulta em

$$\Psi(x) = L^{-1} \left\{ \bar{B}(s) \right\} \Psi(0) \quad (2.30)$$

onde L^{-1} denota a inversa da transformada de Laplace.

Invertendo-se a matriz $\bar{M}_{GN}(s)$ e aplicando a técnica de expansão de Heaviside para a inversa da transformada, chega-se à solução analítica para a variável espacial do fluxo angular,

$$\Psi(x) = B(x) \Psi(0) \quad (2.31)$$

onde

$$B(x) = L^{-1} \left\{ \frac{\text{adj}(\bar{M}_{GN}(s))}{\det(\bar{M}_{GN}(s))} \right\} = \sum_{k=1}^{GN} \left\{ \frac{\text{adj}(\bar{M}_{GN}(s_k))}{\frac{d}{ds} \det(\bar{M}_{GN}(s_k))} \right\} e^{s_k x} = \sum_{k=1}^{GN} P_k e^{s_k x} \quad (2.32)$$

onde s_k são as raízes do determinante da matriz $\bar{M}_{GN}(s)$ e

$$P_k = \left\{ \frac{\text{adj}(\bar{M}_{GN}(s_k))}{\frac{d}{ds} \det(\bar{M}_{GN}(s_k))} \right\} \Big|_{s=s_k} \quad (2.33)$$

onde P_k é o conjunto de matrizes $GN \times GN$ e,

$$b_{ij}(x) = \sum_{k=1}^{GN} p_{k_{ij}} e^{s_k x} \quad (2.34)$$

onde $b_{ij}(x)$ são os elementos da matriz $B(x)$.

Para calcular as componentes desconhecidas do vetor $\Psi(o)$, aplica-se $x = x_1$ na equação 2.31 e utiliza-se a condição de contorno da equação 2.19b, obtendo uma equação matricial em bloco da equação 2.31,

$$\begin{bmatrix} \Psi_1(x_1) \\ \Psi_2(x_1) \end{bmatrix} = \begin{vmatrix} B_{11}(x_1) & B_{12}(x_1) \\ B_{21}(x_1) & B_{22}(x_1) \end{vmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1(0) \\ \Psi_2(0) \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

onde as $N/2$ componentes dos vetores $\Psi_1(0)$ e $\Psi_2(x_1)$ são conhecidas e,

$$\Psi_2(0) = (B_{22}(x_1))^{-1} [\Psi_2(x_1) - B_{21}(x_1) \Psi_1(0)] \quad (2.36)$$

as $N/2$ componentes dos vetores $\Psi_2(0)$ são calculadas, sendo calculado o vetor fluxo angular dado pela equação 2.31.

Nos problemas de transporte que envolvem placas planas de grandes espessuras ou elevadas ordens de quadraturas, podem ocorrer erros de overflow originados na avaliação de exponenciais com argumentos s_k positivos. Esta dificuldade é contornada efetuando-se uma mudança de base, o que determina a solução por

$$\Psi(x) = \left(\sum_{\substack{k=1 \\ s_k > 0}}^{GN} P_k e^{-s_k(x_1-x)} + \sum_{\substack{k=1 \\ s_k < 0}}^{GN} P_k e^{s_k(x)} \right) \Psi^*(0) \quad (2.37)$$

onde $\Psi^*(0) = C(x_1) \times \Psi(0)$ é o vetor de GN componentes que representam os fluxos angulares modificados originados pela mudança de base em $x = 0$ e definido por

$$\Psi^*(0) = \begin{bmatrix} \Psi_{11}^*(0) \\ \vdots \\ \Psi_{1N}^*(0) \\ \vdots \\ \Psi_{G1}^*(0) \\ \vdots \\ \Psi_{GN}^*(0) \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

onde $\Psi^*(0)$, corresponde ao componente do fluxo angular modificado pelo processo de translação do sistema de coordenadas em $x = 0$ na direção discreta μ_j e $C(x_1)$ é a matriz $GN \times GN$ representada por

$$C(x_1) = \left(\sum_{\substack{k=1 \\ s_k > 0}}^{GN} P_k e^{-s_k(x_1)} + \sum_{\substack{k=1 \\ s_k < 0}}^{GN} P_k \right)^{-1}. \quad (2.39)$$

2.3 Equação de Transporte em Multirregiões e Multigrupos

A derivação da formulação LTS_N anteriormente feita para problemas em meios homogêneos, pode ser generalizada para problemas de transporte em geometria unidimensional, placa heterogênea formada de R regiões e G grupos de energia, como mostra a figura 2.2

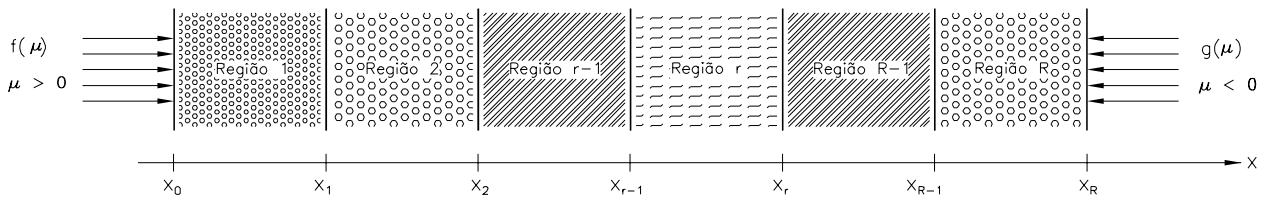


Figura 2.2 – Representação gráfica de uma placa heterogênea de R regiões.

Em problemas de multirregiões, como mostrado na figura 2.2, a formulação LTS_N deve ser aplicada em cada uma das R regiões, o que determina uma solução específica para

cada uma das correspondentes regiões de interesse, conforme [Barichello, 1992]. Dessa forma, a equação de transporte na forma discretizada pode ser escrita,

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_{g,i}^r(x)}{dx} + \frac{\Sigma_{tq}^r}{\mu_j} \Psi_{g,j}^r(x) &= \frac{\chi_g}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \nu_{g'}^r \Sigma_{fg'}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i + \\ \frac{1}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \Sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i & \end{aligned} \quad (2.40)$$

com $i = 1, 2, \dots, N(par)$, $j = 1, 2, \dots, N(par)$, $g = 1, 2, \dots, G$, sujeita às condições de contorno iguais das equações 2.19a e 2.19b.

A solução LTS_N, com sua devida mudança de base, toma a seguinte forma:

$$\Psi_{GN}^r(x) = \left(\sum_{\substack{k=1 \\ s_k > 0}}^{GN} P_k e^{-s_k^r(x_r-x)} + \sum_{\substack{k=1 \\ s_k < 0}}^{GN} P_k e^{s_k^r(x)} \right) \Psi_{GN}^{*r}(x_{r-1}) \quad (2.41)$$

com $x_{r-1} \leq x \leq x_r$, $r = 1, 2, \dots, R$, onde $\Psi_{GN}^r(x)$ é o vetor de GN componentes que representa o fluxo angular nas N direções e G grupos da região r , definido por

$$\Psi_{GN}^r(x) = \begin{bmatrix} \Psi_{11}^r(x) \\ \vdots \\ \Psi_{1N}^r(x) \\ \vdots \\ \Psi_{G1}^r(x) \\ \vdots \\ \Psi_{GN}^r(x) \end{bmatrix} \quad (2.42)$$

sendo $\Psi_{g,j}^r(x)$ o fluxo angular na direção μ_j e grupo g em energia na região r ; P_k^r são as matrizes ($GN \times GN$) dos coeficientes da decomposição em frações parciais da matriz $A_{GN}(s)$ na região r ; s_k^r são as raízes do polinômio característico da matriz $A_{GN}(s)$ na região r e $\bar{\Psi}_{GN}^{*r}(x_{r-1})$ é o vetor de GN componentes do fluxo angular em $x = x_{r-1}$ (origem da região r) na nova base, definido por

$$\bar{\Psi}_{GN}^{*r}(x_{r-1}) = \begin{bmatrix} \Psi_{11}^{*r}(x_{r-1}) \\ \vdots \\ \Psi_{1N}^{*r}(x_{r-1}) \\ \vdots \\ \Psi_{G1}^{*r}(x_{r-1}) \\ \vdots \\ \Psi_{GN}^{*r}(x_{r-1}) \end{bmatrix} \quad (2.43)$$

sendo $\Psi_{g,j}^{*r}(x_{r-1})$ o fluxo angular modificado em $x = x_{r-1}$ na direção μ_j e grupo g na região r . Para facilitar a compreensão do problema de multirregiões, na figura 2.2, pode-se efetuar uma translação da variável espacial para cada região, de forma a obter-se um conjunto de R placas justapostas, ver figura 2.3.

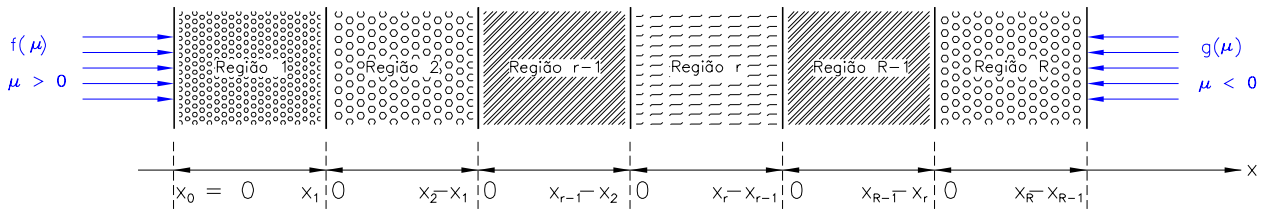


Figura 2.3 – Representação gráfica de uma placa heterogênea de R regiões com translação na variável espacial.

Assim, tem-se

$$\Psi_{GN}^r(x) = \left(\sum_{\substack{k=1 \\ s_k > 0}}^{GN} P_k e^{-s_k^r((x_r - x_{r-1}) - x)} + \sum_{\substack{k=1 \\ s_k < 0}}^{GN} P_k e^{s_k^r(x + x_{r-1})} \right) \Psi_{GN}^{*r}(0) \quad (2.44)$$

com $0 \leq x \leq x_r - x_{r-1}$, $r = 1, 2, \dots, R$, onde $\bar{\Psi}_{GN}^{*r}(0)$ é o vetor de GN componentes que representam os fluxos angulares modificados na nova base em $x = 0$ na região r , dado por

$$\Psi_{GN}^{*r}(0) = \begin{bmatrix} \Psi_{11}^{*r}(0) \\ \vdots \\ \Psi_{1N}^{*r}(0) \\ \vdots \\ \Psi_{G1}^{*r}(0) \\ \vdots \\ \Psi_{GN}^{*r}(0) \end{bmatrix}, \quad (2.45)$$

sendo $\Psi_{g,j}^{*r}(0)$ o fluxo angular modificado em $x = 0$ na direção μ_j e região r .

De maneira análoga ao problema homogêneo, onde as condições de contorno são conhecidas $\frac{N}{2}$ componentes do fluxo angular:

$$\Psi_{g,k}(0) = f_{g,k}, \quad \mu_k > 0 \quad (2.46a)$$

$$\Psi_{g,k+\frac{N}{2}}(x_R - x_{R-1}) = g_{g,k}, \quad \mu_{k+\frac{N}{2}} < 0 \quad (2.46b)$$

Contudo, para que o fluxo angular fique completamente definido nas fronteiras do domínio, devem ser consideradas condições de continuidade do fluxo angular nas interfaces de cada uma das regiões, dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi^1(x_1) = \Psi^2(0) \\ \Psi^2(x_2 - x_2) = \Psi^3(0) \\ \vdots = \vdots \\ \Psi^r(x_r - x_{r-1}) = \Psi^{r+1}(0) \\ \vdots = \vdots \\ \Psi^{R-1}(x_{R-1} - x_{R-2}) = \Psi^R(0) \end{array} \right. \quad (2.47)$$

onde $\Psi^r(x_r - x_{r-1}) = \Psi^{r+1}(0)$ indica que as componentes do vetor fluxo angular no ponto $x = (x_r - x_{r-1})$ da região r são iguais as do ponto $x = 0$ da região $(r + 1)$.

2.4 Inversão da Matriz A_N por Diagonalização

Para obter uma solução de fluxo angular com reduzido número de operações, tornando o processamento de dados mais eficiente e possibilitando um maior alcance em ordens de quadraturas, o método da diagonalização foi utilizado para inversão da matriz LTS_N . Para isso considere a matriz $\bar{M}_N(s)$ escrita como:

$$\bar{M}_N(s) = (sI - A) \quad (2.48)$$

A aplicação do método de diagonalização consiste em decompor a matriz A associada ao problema S_N de transporte (equação 2.22), através de uma relação de similaridade como,

$$A = V D V^{-1} \quad (2.49)$$

onde D é uma matriz diagonal contendo os autovalores de A e V é a matriz dos autovetores correspondentes. Utilizando a inversa de $\bar{M}_N(s)$ e substituindo a decomposição de A , obtemos

$$\begin{aligned} \bar{M}_N^{-1}(s) &= [(sI - A)]^{-1} \\ &= [(sV V^{-1} + V D V^{-1})]^{-1} \\ &= [V (sI + D) V^{-1}]^{-1} \\ &= V (sI + D)^{-1} V^{-1} \end{aligned} \quad (2.50)$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace a expressão 2.50, obtém-se

$$B(x) = L^{-1} \{ \bar{M}_N^{-1}(s) \} = B(x) = V L^{-1} \{ (sI - D)^{-1} \}^{-1} V^{-1} \quad (2.51)$$

com

$$(sI - D) = \begin{bmatrix} s - s_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s - s_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s - s_N \end{bmatrix} \quad (2.52)$$

e conseqüentemente, a inversa de $sI + D$ é escrita como:

$$(sI - D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s-s_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s-s_2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s-s_N} \end{bmatrix} \quad (2.53)$$

relembrando que a solução para o fluxo angular (2.31) expressa como,

$$\Psi(x) = B(x) \Psi(0) \quad (2.54)$$

onde

$$B(x) = V e^{-Dx} V^{-1} \quad (2.55)$$

como D representa a matriz dos N autovalores da matriz $B(x)$ correspondentes aos autovalores s_k , com $k = 1, 2, \dots, N$, pode-se escrever que

$$D = \begin{bmatrix} s_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & s_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & s_N \end{bmatrix}. \quad (2.56)$$

Deixando as raízes s_k em forma antissimétricas, a matriz D pode ser decomposta como a soma de duas matrizes contendo autovalores de sinais contrários, e definida como

$$D = [D^+ + D^-] \quad (2.57)$$

onde D^+ são as $N/2$ raízes positivas e D^- são as $N/2$ raízes negativas. Com esta decomposição a matriz $B(x)$ pode ser escrita da seguinte maneira,

$$B(x) = [B^+ + B^-] \quad (2.58)$$

onde

$$B(x) = \begin{cases} V e^{(-D)x} V^{-1}, & s_k > 0 \\ V e^{-Dx} V^{-1}, & s_k < 0. \end{cases} \quad (2.59)$$

Logo, o vetor fluxo angular assume a forma

$$\Psi(x) = B(x) \Psi(0) . \quad (2.60)$$

Nota-se que para obtenção de uma solução do fluxo angular da equação de transporte pelo método da diagonalização é necessário que os autovalores da equação sejam todos distintos. Caso apareçam autovalores repetidos, deve-se tentar outros métodos de decomposição para inverter a matriz LTS_N .

2.5 Cálculo de Criticalidade pelo LTS_N

Um reator nuclear é uma montagem na qual se processa e ocorre uma cadeia auto-sustentável com a finalidade de produzir uma taxa constante de produção de energia, proveniente de uma reação de fissão em cadeia. As fissões dos núcleos pesados (U^{235} , U^{233} e Pu^{239}) que mantêm as reações em cadeia em um reator nuclear, podem ser provocadas por nêutrons térmicos, intermediários ou rápidos, sendo que esta propriedade permite a classificação do tipo de reator devido à energia dos nêutrons que provocam as fissões. Os reatores são constituídos por: moderadores (D^2 , Be^9 , C^{12} e H^1) que tem como finalidade diminuir a

energia média dos nêutrons por meio de interações; refrigerante que pode ser de materiais de baixa seção de choque de absorção, tais como gases (CO_2 , O_2 e He), líquidos (H_2O , D_2O), líquidos orgânicos e metais líquidos (Na, K ou ligas de Na-K); e finalmente o revestimento que envolve os elementos combustíveis.

No projeto de um reator nuclear as condições ideais para a criticalidade dependem de diversos parâmetros, sendo que dois aspectos físicos importantes são: a geometria do reator e a composição da estrutura e do combustível do reator. As dimensões do reator são de extrema importância devido à fuga de nêutrons através de sua superfície, diminuindo estas perdas pelo acréscimo de superfície externa. Quanto à composição do reator conforme os parâmetros acima, tem-se a manutenção da reação de fissão em cadeia, com o propósito de equilibrar no sistema a população, geração e absorção de nêutrons pela própria composição e estrutura do reator.

O problema de criticalidade consiste em determinar alguns parâmetros físicos, tais como espessura crítica, fator ou constante de multiplicação de nêutrons e o enriquecimento (number density) necessários para a manutenção da reação em cadeia. De todos esses parâmetros o mais relevante é o fator de multiplicação (K), que pode ser definido como a razão entre duas gerações sucessivas de nêutrons de fissão [Duderstadt e Martin, 1979] e, de acordo com o comportamento de uma população de nêutrons em função do tempo, pode ser classificado como:

- a) subcrítico ($K < 1$), quando a população inicial de nêutrons não nula, tende a zero com o passar do tempo, isto é, o número de fissões de uma geração é menor do que na geração anterior;
- b) crítico ($K = 1$), quando a população de nêutrons se mantém estável e independente do tempo, a população de nêutrons e o número de fissões em uma geração é igual ao da anterior, ambos permanecem constante;
- c) supercrítico ($K > 1$), no caso da população de nêutrons e as fissões serem maiores em cada geração subsequente, crescendo com o tempo.

Modelando o problema de criticalidade pela equação de transporte em sua forma estacionária e independente do tempo (equação 2.6a) e empregando o método LTS_N , reduz-se o problema de criticalidade à solução de equações transcendentais, como veremos a seguir.

MÉTODO LTS_N APLICADO A PROBLEMAS DE CRITICALIDADE

3.1 Determinação da Equação Transcendental

Aplicando o método LTS_N em uma placa plana heterogênea de R regiões, G grupos de energia e com condições de contorno do tipo vácuo em suas extremidades, bem como da continuidade dos fluxos angulares nas interfaces originam o sistema homogêneo

$$A\Psi_{RGN}^*(0) = [0]_{RGN}, \quad (3.1)$$

onde $A\Psi_{RGN}^*(0)$ é o vetor de RGN componentes que representam os fluxos angulares modificados nas N direções de G grupos em cada uma das R regiões, definido por

$$\bar{\Psi}_{RGN}^*(0) = \begin{bmatrix} \Psi_{11}^{*1}(0) \\ \vdots \\ \Psi_{1N}^{*1}(0) \\ \vdots \\ \Psi_{G1}^{*R}(0) \\ \vdots \\ \Psi_{GN}^{*R}(0) \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

sendo $\Psi_{gj}^{*r}(0)$ o fluxo angular modificado com direções μ_j e grupo g na região r ; $[0]_{RGN}$ é um vetor nulo de RGN componentes, A é uma matriz $RGN \times RGN$ obtida pela aplicação das condições de contorno e de continuidade para o fluxo angular nas interfaces do problema.

Nota-se que os elementos de A podem ser expressos por blocos ou submatrizes B , na forma

$$\left[\begin{array}{ccccc} B^1(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ B^1(x_1) & -B^2(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ [0]_{GN \times GN} & -B^2(x_2 - x_1) & -B^3(0) & \cdots & [0]_{GN \times GN} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & \cdots & -B^R(0) \\ [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & B^R(x_R - x_{R-1}) \end{array} \right] \Psi_{RGN}^*(0) = [0]_{RGN} \quad (3.3)$$

onde $B^1(0)$ é a matriz $GN/2 \times GN$ resultante da aplicação de $GN/2$ condições de contorno em $x = 0$ da região 1 nas direções positivas no termo referente ao somatório de matrizes P_s^i da equação de multirregiões e $B^R(x_R - x_{R-1})$ é a matriz $GN/2 \times GN$ obtida pela aplicação das condições de contorno em $x = (x_R - x_{R-1})$ da região R nas direções negativas deste mesmo termo. Os demais blocos apresentados são matrizes de dimensão $GN \times GN$ correspondentes às condições de interface, enquanto as componentes restantes da matriz A são submatrizes nulas de dimensão variável.

O sistema linear homogêneo expresso em 3.3 apresenta solução não-trivial se, e somente se,

$$\det(A) = \det \left[\begin{array}{ccccc} B^1(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ B^1(x_1) & -B^2(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ [0]_{GN \times GN} & -B^2(x_2 - x_1) & -B^3(0) & \cdots & [0]_{GN \times GN} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & \cdots & -B^R(0) \\ [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & B^R(x_R - x_{R-1}) \end{array} \right] = 0 \quad (3.4)$$

A equação 3.4 constitui-se na equação transcendental de criticalidade.

Para outros tipos de condições de contorno homogêneas aplica-se o mesmo procedimento aqui descrito.

3.2 Determinação da Espessura

A metodologia proposta para solucionar a equação transcendental referente a um problema de criticalidade numa placa plana heterogênea de R regiões e sujeita a G grupos de energia, no caso de cálculo da espessura crítica, pode ser descrita basicamente em duas etapas: a primeira caracterizada pela determinação do intervalo I que contenha a menor dentre as raízes positivas (raiz α) que satisfazem a equação transcendental, e a segunda baseada num processo iterativo para cálculo desta raiz. O processo é inicializado estabelecendo-se a região (npos) cuja espessura será avaliada. A seguir toma-se a ordem de quadratura $N = 2$ e passa-se a avaliar o determinante da matriz das condições de contorno A ($\det(A)$) a partir da espessura da região imediatamente anterior à desejada ($\text{esp}(\text{npos} - 1)$), efetuando-se pequenos incrementos (0,0001 unidades) sucessivamente. Este processo caracteriza uma varredura crescente e tem por objetivo estabelecer o intervalo em que se encontra a primeira raiz positiva que satisfaz a equação transcendental para $N = 2$. Os limites do intervalo são estabelecidos a partir de uma análise dos valores obtidos para $\det(A)$, segundo o princípio do método da bissecção. Analisa-se assim a variação de sinal para o determinante $\det(A)$ nos diferentes pontos utilizados, sendo que no caso deste resultado ser um número complexo esta variação deve ser observada tanto na parte real quanto na imaginária. Como exemplo, tendo-se observado que a primeira variação de sinal ocorre entre as espessuras a e b , constrói-se o intervalo $I_2 = [a; b]$. Com este intervalo inicia-se um processo iterativo para determinação da espessura crítica. Para tal, considera-se como aproximação inicial (chute inicial) do processo iterativo a média aritmética dos limites do intervalo I_2 ($\alpha_2 = \frac{a+b}{2}$). Busca-se então determinar uma seqüência de valores α_N , $N = 4, 6, \dots$, convergente para a espessura crítica (Esp Crit), tendo por base intervalos que são sucessivamente refinados a medida que a ordem de quadratura N aumenta. Tomando-se então $N = 4$, $I_4 = [\alpha_2 - 0,5; \alpha_2 + 0,5]$ (intervalo centrado em α_2 com uma margem de variação de 0,5) e efetua-se uma discretização neste intervalo (num disc partes), ou seja, o mesmo é subdividido em várias partes, avaliando-se o módulo do determinante da matriz $A(|\det(A)|)$ em cada um dos pontos da discretização. Tem-se então α_4 (segundo termo da seqüência) como sendo o ponto que minimiza $|\det(A)|$ no intervalo I_4 . Com as primeiras aproximações (α_2) e (α_4) efetua-se o primeiro refinamento para o intervalo de busca. Tal refinamento é realizado calculando-se o erro relativo entre estas duas aproximações ($ER = \left| \frac{\alpha_4 - \alpha_2}{\alpha_4} \right|$), determinando-se assim o intervalo $I_6 = [\alpha_4 - ER; \alpha_4 + ER]$ a ser

utilizado para determinação da aproximação α_6 após nova discretização intervalar. Genericamente este processo é realizado da seguinte maneira para ordens de quadratura $N \geq 6$: calcula-se o erro relativo ER determinado pelas duas últimas aproximações consecutivas para a raiz α , dado por

$$ER = \left| \frac{\alpha_{N-2} - \alpha_{N-4}}{\alpha_{N-2}} \right| \quad (3.5)$$

e constrói-se um novo intervalo de busca, definido por

$$I_N = [\alpha_{N-2} - ER; \alpha_{N-2} + ER] \quad (3.6)$$

a ser discretizado para determinação de α_N . Como critério de parada para este processo iterativo foi utilizado o erro relativo verificado entre duas aproximações ($ER \leq 10^{-5}$) conforme 3.5, não importando o valor de N utilizado para determinação da raiz α , e considerando-se a espessura crítica como sendo a última aproximação α_N calculada.

3.3 Determinação do Fator de Multiplicação de Nêutrons K_{eff}

No caso do problema expresso na equação 3.1 referir-se à determinação do fator de multiplicação efetivo de nêutrons K_{eff} o processo é basicamente o mesmo utilizado no caso da espessura crítica, apresentando-se diferenciado somente na determinação do intervalo inicial. Neste caso, toma-se a ordem de quadratura $N = 2$ e passa-se a avaliar o determinante da matriz das condições de contorno A ($\det(A)$) para os valores de K_{eff} pertencente à faixa $0,01 \leq K \leq 1,4$ a partir de 0,01, efetuando-se pequenos incrementos a este parâmetro (- 0,0001 unidades) sucessivamente. Este processo caracteriza uma varredura crescente e tem por objetivo estabelecer o intervalo em que se encontra a primeira raiz positiva que satisfaz a equação transcendental para $N = 2$. Os limites do intervalo são determinados a partir de uma análise dos valores obtidos para $\det(A)$, segundo o princípio do método da bissecção, estabelecendo assim o intervalo I_2 . Como aproximação inicial (chute inicial) do processo iterativo a ser desenvolvido é novamente considerada a média aritmética dos limites do intervalo I_2 , determinando-se α_2 e buscando então uma seqüência de valores α_N , $N =$

4, 6, ..., convergente para o fator de multiplicação efetivo K_{eff} , tendo por base intervalos que são sucessivamente refinados a medida que a ordem de quadratura N aumenta. Tomando-se então $N = 4$ e $I_4 = [\alpha_2 - 0,05; \alpha_2 + 0,05]$ ($\alpha_2 \pm 0,05$) efetua-se uma discretização em I_4 (num disc partes) e considera-se α_4 como sendo o ponto que minimiza $|\det(A)|$ neste intervalo. A determinação dos próximos intervalos de busca, bem como o critério de parada para o processo, são análogos aos descritos no algoritmo da espessura crítica, bastando que seja estabelecido um limite para o erro relativo para a raiz calculada e considerando-se K_{eff} a última aproximação α_N obtida.

3.4 Determinação da Concentração Atômica

Para fazer o cálculo de concentrações atômicas (number density) utiliza-se da mesma metodologia para determinar o cálculo da espessura crítica, diferenciando-se apenas com relação as dimensões do intervalo de busca das raízes da equação transcendental. O processo, também inicia-se estabelecendo a região (npos) cuja concentração será analisada e de uma estimativa inicial para a concentração atômica, somente no termo correspondente a seção de choque microscópica de fissão σ_f , redefinindo-a em termos de seção de choque macroscópica e com o número médio de nêutrons emitidos por fissão, conforme a equação

$$\Sigma_f = n_{ff} \sigma_f . \quad (3.7)$$

A raiz de interesse corresponde ao número de núcleos de material físsil por cm^3 de combustível.

3.5 Determinação do Enriquecimento (Density Number)

Depois de encontrada a concentração atômica n_{ff} , pode-se então calcular o enriquecimento atômico r_a a partir da equação 3.8 [El-Wakil, 1971],

$$n_{ff} = \frac{A_v}{m_{ff}} r_a f \rho_{fm} i_f \quad (3.8)$$

onde A_v é o número de Avogadro $\frac{0,60225 \times 10^{24} \text{ moléculas}}{\text{g mol}}$, m_{ff} é a massa molecular do combustível físeis, ρ_{fm} é a densidade do combustível físeis em $\frac{\text{g mol}}{\text{cm}^3}$, i_f é o número de átomos por molécula de combustível e f é a fração mássica de combustível no material combustível que na sua forma integra é descrita por:

$$f = \frac{\frac{r_a}{r_a + (1-r_a) \left(\frac{m_{ff}}{m_{nf}}\right)} m_{ff} + \frac{(1-r_a)}{r_a \left(\frac{m_{nf}}{m_{ff}}\right) + (1-r_a)} m_{nf}}{\frac{r_a}{r_a + (1-r_a) \left(\frac{m_{ff}}{m_{nf}}\right)} m_{ff} + \frac{(1-r_a)}{r_a \left(\frac{m_{nf}}{m_{ff}}\right) + (1-r_a)} m_{nf} + m_{O_2}} \quad (3.9)$$

onde agora m_{nf} e m_{O_2} são as massas moleculares do combustíveis não-físeis. Para os casos onde a $m_{ff} \simeq m_{nf}$ utiliza-se a equação simplificada:

$$f = \frac{r m_{ff} + (1-r) m_{nf}}{r m_{ff} + (1-r) m_{nf} + m_{O_2}} \quad (3.10)$$

isolando r_a ,

$$r_a = \frac{n_{ff} m_{ff}}{A_v \rho_{fm} i_f} \frac{1}{f} \quad (3.11)$$

definindo,

$$X \equiv \frac{n_{ff} m_{ff}}{A_v \rho_{fm} i_f}, \quad (3.12)$$

conhecendo o inverso da fração mássica,

$$\frac{1}{f} = \frac{r m_{ff} + (1-r) m_{nf} + m_{O_2}}{r m_{ff} + (1-r) m_{nf}} \quad (3.13)$$

e substituindo as equações 3.12 e 3.13 na equação 3.11, obtém-se,

$$r_a = X \left(\frac{r_a m_{ff} + (1-r_a) m_{nf} + m_{O_2}}{r_a m_{ff} + (1-r_a) m_{nf}} \right). \quad (3.14)$$

A equação 3.14 pode ser reescrita como:

$$r_a (m_{ff} - m_{nf}) + r \left[m_{nf} + \frac{(m_{nf} - m_{ff}) n_{ff} m_{ff}}{A_v \rho_{fm} i_f} \right] - \frac{(m_{nf} - m_{O_2}) n_{ff} m_{ff}}{A_v \rho_{fm} i_f} = 0 \quad (3.15)$$

definindo

$$a = m_{ff} - m_{nf} \quad (3.16a)$$

$$b = m_{nf} + \frac{(m_{nf} - m_{ff}) n_{ff} m_{ff}}{A_v \rho_{fm} i_f} \quad (3.16b)$$

$$c = \frac{(m_{nf} - m_{O_2}) n_{ff} m_{ff}}{A_v \rho_{fm} i_f} \quad (3.16c)$$

pode-se reescever a equação 3.15 na seguinte forma

$$ar_a^2 + br_a - c = 0 \quad (3.17)$$

logo

$$r_a = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 + 4ac}}{2a} \quad (3.18)$$

encontram-se duas raízes, uma negativa e outra positiva, sendo que a positiva corresponde ao enriquecimento. Caso o combustível seja urânio, sabe-se que as concentrações são de 99,3% para o U^{238} e de 0,7% para o U^{235} . Sendo assim, denomina-se de concentração empobrecida valores $\leq 0,7\%$ e de concentração enriquecida para os casos de $\geq 0,7\%$ em U^{235} .

3.6 Determinação do Fluxo Escalar

Levando em consideração as equações de condição de contorno 2.19a; 2.19b e fluxo angular da equação 2.31, podemos determinar o fluxo escalar como

$$[\Phi_g^r(x)] = \left[\sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^N \Psi_{g,i}^{*r}(x) w_i \right] \quad (3.19)$$

com $g = 1, 2, \dots, G$ grupo de energia, $i = 1, 2, \dots, N$ (par) e $r = 1, 2, \dots, R$ regiões.

A densidade $\left[\frac{\text{nêutrons}}{\text{cm}^3}\right]$ e o fluxo de nêutrons $\left[\frac{\text{nêutrons}}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}}\right]$ não são uniformes dentro do reator devido a fuga através da superfície externa. Dentro do núcleo do reator os nêutrons sofrem muitas colisões e, na verdade, "acumulam-se" com densidade máxima no centro. O comportamento da curva de distribuição do fluxo de nêutrons no interior do reator é de grande interesse tanto para o controle como para a produção de energia ou a irradiação experimental de amostras.

3.7 Determinação da Potência

Agora pode-se facilmente obter uma relação entre a taxa de produção de calor ou potência específica e fluxo escalar Φ_g^r da equação 3.19 e a seção de choque macroscópica de fissão Σ_{fg}^r . A potência de um reator é dada por [Henry, 1975]:

$$P_g^r(x) = \frac{\Phi_g^r(x) \Sigma_{fg}^r}{3,3 \times 10^{10}} \quad (3.20)$$

lembrado que a equação 3.20 pode ser reescrita levando em consideração a seção de choque microscópica de fissão σ_f e a concentração atômica n_{ff} , obtendo-se para a potência, a seguinte relação:

$$P_g^r = \frac{\Phi_g^r n_{ffg}^r \sigma_{fg}^r}{3,3 \times 10^{10}}. \quad (3.21)$$

Para produzir 1 *watt* de potência são necessárias em torno de $3,3 \times 10^{10}$ fissões por segundo.

RESULTADOS NUMÉRICOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados os resultados da simulação numérica obtidos através do metodologia de cálculo proposta, na determinação de parâmetros de criticalidade e na obtenção da potência específica para placa plana, unidimensionais. Foi desenvolvido um código computacional e o mesmo foi empregado na determinação da espessura, fator de multiplicação de nêutrons, concentração atômica, fluxo escalar e da potência específica em problemas de placas heterogêneas, sem a presença de fontes externas, espalhamento isotrópico e modelos de multigrupos de energia. As rotinas que constituem o corpo do código foram implementadas em linguagem Fortran 90 e processadas num computador de uso pessoal PC, de arquitetura IBM dotado de um processador Pentium 233MMX com 16Mb de memória RAM.

Inicialmente são apresentados resultados para problema homogêneo e após problema heterogêneo, formado por diferentes regiões.

4.1 Cálculo do Fator de Multiplicação Efetivo, Cálculo de Espessura, Cálculo da Concentração Atômica, do Enriquecimento Atômico e da Potência Específica em Placa Homogênea com um Grupo de Energia

Problema 4.1a - Cálculo do fator de multiplicação efetivo, para uma placa homogênea, composta por uma região e um grupo de energia, espalhamento isotrópico e condições de contorno do tipo vácuo. Neste problema, considera-se uma placa plana homogênea conforme está representado na figura 4.1. Os dados de entrada do programa são mostrados na tabela 4.1. O problema a ser resolvido é dado por:

$$\frac{d}{dx}\Psi_i(x) + \frac{\Sigma_t}{\mu_i}\Psi_i(x) = \frac{\Sigma_s}{2\mu_i} \sum_{k=1}^N \Psi_k(x) w_k + \frac{\chi\nu\Sigma_f}{2\mu_i K_{eff}} \sum_{k=1}^N \Psi_k(x) w_k \quad (4.1)$$

e condições de contorno do tipo vácuo,

$$\Psi_i(x = 0 \text{ cm}) = 0, \quad \mu > 0 \quad (4.2a)$$

$$\Psi_i(x = 10 \text{ cm}) = 0, \quad \mu < 0. \quad (4.2b)$$



Figura 4.1 – Representação gráfica de uma placa homogênea e condições de contorno do tipo vácuo.

Tabela 4.1 – Dados de Entrada - Problema 4.1a

χ	$\nu\Sigma_f$	Σ_t	Σ_s	Espessura
1,0000	0,1000	1,0000	0,9200	10,0000

Os resultados obtidos para o cálculo do fator de multiplicação efetivo, K_{eff} , utilizando o método da diagonalização ($K_{eff} - diag$) encontra-se na tabela 4.2, para ordens de quadratura variando de 2 a 30.

Tabela 4.2 – Resultado K_{eff} obtido pelo método LTS_N para espessura da placa de 10 cm - Problema 4.1a

N	K_{eff}
2	0,9390499
4	0,9547834
6	0,9529338
8	0,9531862
10	0,9533038
20	0,9534294
30	0,9534629

Analisando os resultados obtidos, nota-se que para N variando de 20 a 30 tem-se, no mínimo, 4 algarismos significativos. Esses valores foram colocados em um gráfico de K_{eff} versus ordem de quadratura, onde pode-se verificar a convergência numérica do método para $N > 6$.

A título de validação do programa desenvolvido, os resultados obtidos foram comparados com os de [Batistela, 1997] e com os obtidos com o código ANISN, sendo possível observar que a aproximação LTS_{30} apresenta uma coincidência de quatro dígitos significativos em comparação com o resultado obtido por [Batistela, 1997] para $N = 20$ (0,9534320) e pelo ANISN para $N = 32$ (0,95343).

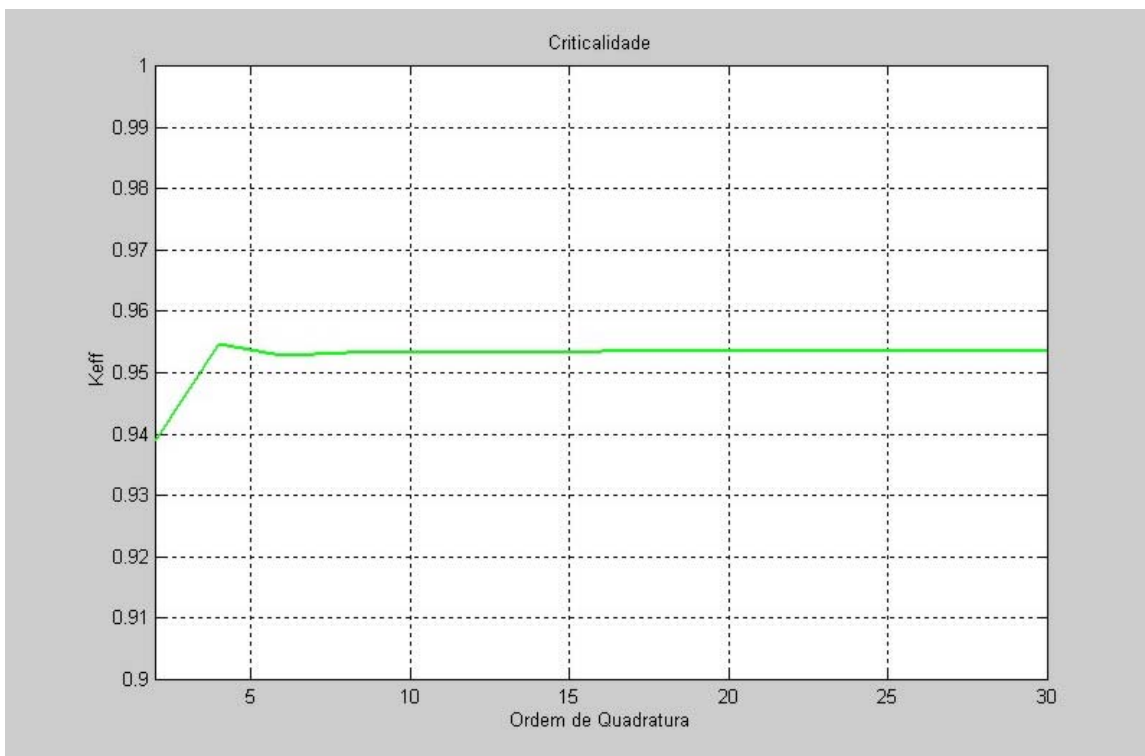


Figura 4.2 – Gráfico do K_{eff} para placa homogênea com espessura de 10 cm - Problema 4.1a .

Problema 4.1b - Cálculo da espessura para uma placa homogênea, composta por uma região e um grupo de energia e condições de contorno do tipo vácuo. Neste problema, considera-se uma placa plana homogênea conforme está representado na figura 4.1 e os dados do problema 4.1a, substituindo o parâmetro de interesse e considerando $K_{eff} = 0,9534629$. Os dados de entrada do programa são mostrados na tabela 4.1. O problema a ser resolvido é dado por:

$$\frac{d}{dx}\Psi_i(x) + \frac{\Sigma_t}{\mu_i}\Psi_i(x) = \frac{\Sigma_s}{2\mu_i} \sum_{k=1}^N \Psi_k(x) w_k + \frac{\chi\nu\Sigma_f}{2\mu_i K_{eff}} \sum_{k=1}^N \Psi_k(x) w_k \quad (4.3)$$

e condições de contorno do tipo vácuo,

$$\Psi_i(x = 0 \text{ cm}) = 0, \quad \mu > 0 \quad (4.4a)$$

$$\Psi_i(x = x_1 \text{ cm}) = 0, \quad \mu < 0 \quad (4.4b)$$

$i = 1, 2, \dots, N$ (par) e fator de multiplicação efetivo - $K_{eff} = 0,9534629$.

Os resultados obtidos para o cálculo de espessura, utilizando-se o método de diagonalização ($K_{eff} - diag$) é mostrado na tabela 4.3

Tabela 4.3 – Resultado da espessura da placa, obtida com método

LTS_N e considerando $K_{eff} = 0,9534629$ - Probl. 4.1b

N	Espessura (cm)
2	8,6232999
4	10,039260
6	10,015974
8	10,036936
10	10,039029
20	10,039260
30	10,039260

Os resultados mostram, que para $N > 20$ são todos coincidentes e apresentam um erro máximo relativo de 0,03926%.

A convergência numérica do método pode ser verificada no gráfico de espessura versus ordem de quadratura apresentado na figura 4.3.

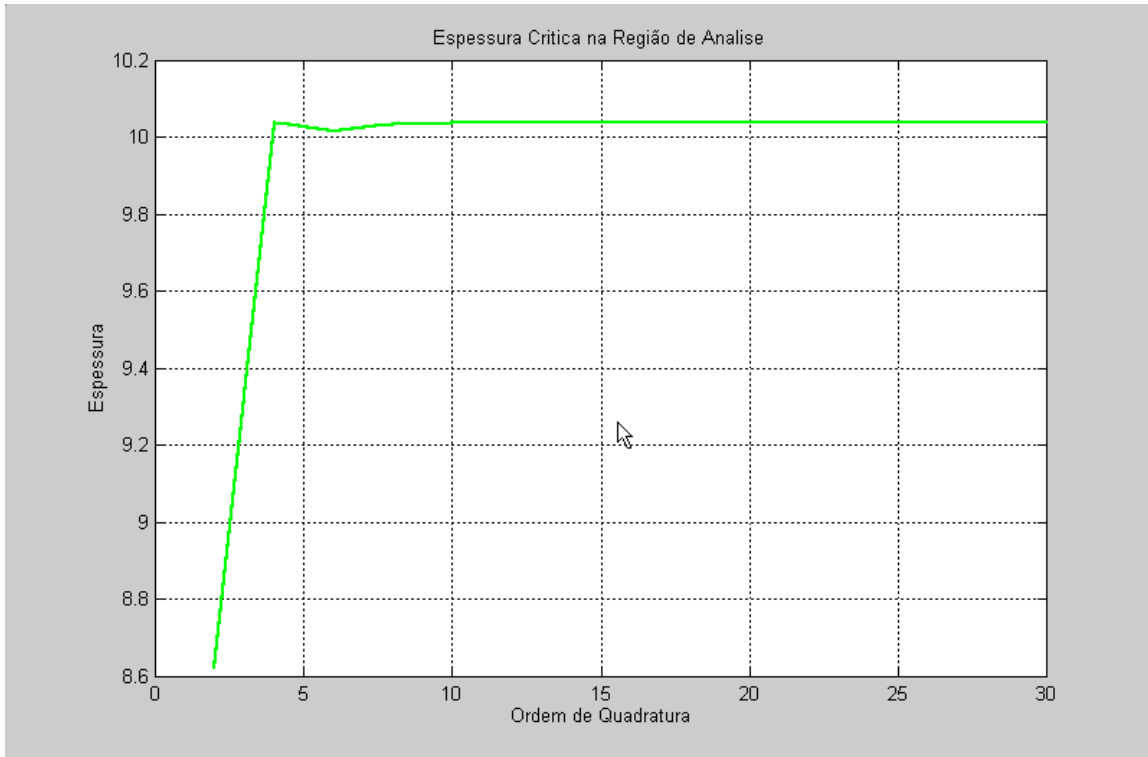


Figura 4.3 – Gráfico da espessura de uma placa homogênea com o $K_{eff} = 0,9534629$ - Problema 4.1b

Problema 4.1c - Cálculo da concentração atômica em placa plana homogênea, composta por uma região e um grupo de energia e condições de contorno do tipo vácuo. Neste problema, considera-se uma placa plana homogênea conforme representado na figura 4.1, substituindo o parâmetro de interesse e considerando $K_{eff} = 0,9534629$ e espessura igual a 10 cm. Os dados de entrada do programa são mostrados na tabela 4.1. O problema a ser resolvido é dado por:

$$\frac{d}{dx}\Psi_i(x) + \frac{\Sigma_t}{\mu_i}\Psi_i(x) = \frac{\Sigma_s}{2\mu_i} \sum_{k=1}^N \Psi_k(x) w_k + \frac{\chi n_{ff} \nu \sigma_f}{2\mu_i K_{eff}} \sum_{k=1}^N \Psi_k(x) w_k \quad (4.5)$$

e condições de contorno do tipo vácuo,

$$\Psi_i(x = 0 \text{ cm}) = 0, \quad \mu > 0 \quad (4.6a)$$

$$\Psi_i(x = 10 \text{ cm}) = 0, \quad \mu < 0 \quad (4.6b)$$

$i = 1, 2, \dots, N$ (par), fator de multiplicação efetivo - $K_{eff} = 0,9534629$ e o valor encontrado da concentração é de $4,75894163 \times 10^{19}$ núcleos de urânio por cm^3 de combustível.

Com o propósito de obter valores numéricos, considera-se que o elemento combustível seja UO_2 . Dessa forma, de posse das propriedades físicas do combustível nuclear UO_2 , conforme tabela 4.4, e do valor da concentração atômica ($n_{ff} = 4,75894163 \times 10^{19} [\frac{\text{núcleos}}{\text{cm}^3}]$) que foi obtida acima, o enriquecimento pode ser determinado.

Tabela 4.4 – Tabela de propriedades do combustível nuclear de UO_2

ρ_{fm} do UO_2	índice(i_f) do U	$m_{ff} = m_{U^{235}}$	$m_{nf} = m_{U^{238}}$	m_{O_2}
10,5	1,0	235,0439	238,0508	15,9944

Número de Avogrado (A_v) : $0.60225E+024 = 0.60225 \times 10^{24}$

Com os dados da tabela 4.4, pode-se determinar os coeficientes a , b e c das respectivas expressões 3.16a, 3.16b e 3.16c, encontra-se o enriquecimento, que no caso é $0,152743028\%$.

Problema 4.1d - Cálculo da potência específica em placa plana homogênea de UO_2 , composta por uma região com um grupo de energia e condições de contorno do tipo vácuo.

Calculando o fluxo escalar Φ pela equação 3.19 e sendo conhecidos a seção de choque microscópica de fissão σ_f e a concentração atômica n_{ff} tabela 4.5, obtém-se a potência específica conforme tabela 4.6.

Tabela 4.5 – Dados de entrada complementares - Problema 4.1d

$\nu\sigma_f$	$n_{ff} [\frac{núcleos}{cm^3}]$
$1,9750 \times 10^{-21}$	$4,75894163 \times 10^{19}$

Tabela 4.6 – Resultado LTS_N do fluxo escalar e da potência específica normalizados na espessura de 10 cm

Posição cm	Fluxo Escalar Φ	Potência Específica P
0,0	0,000000000	0,000000000
2,0	0,675640896	0,675640896
4,0	0,962141209	0,962141209
5,0	1,000000000	1,000000000
6,0	0,962141209	0,962141209
8,0	0,675640896	0,675640896
10,0	0,000000000	0,000000000

Os resultados mostram que a potência específica é máxima no centro da placa, conforme já esperado pela simetria do problema. O comportamento da potência em função da espessura é mostrada no gráfico da figura 4.4.

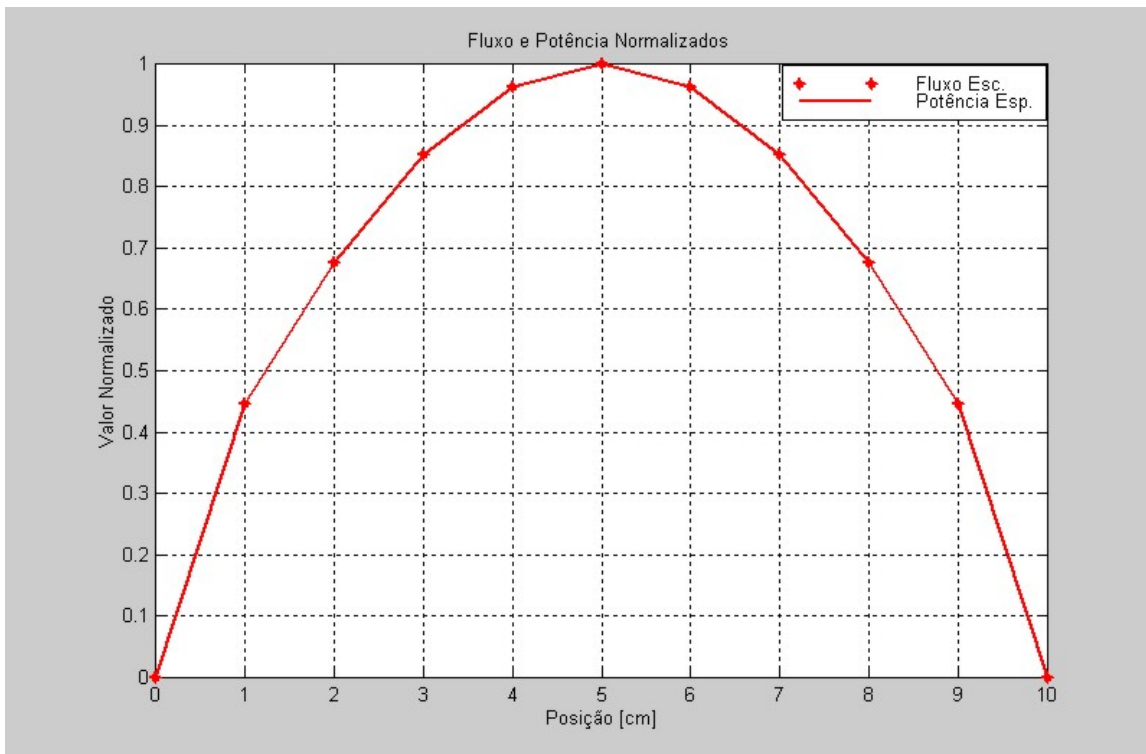


Figura 4.4 – Gráfico do fluxo escalar Φ e da potência específica P normalizados com o $K_{eff} = 0,9534629$ e espessura de 10 cm - Problema 4.1d

4.2 Cálculo do Fator de Multiplicação Efetivo, Cálculo de Espessura, Cálculo da Concentração Atômica, do Enriquecimento Atômico e da Potência Específica em Placa Heterogênea com Multigrupos de Energia

Problema 4.2.1a - Cálculo do fator de multiplicação efetivo, para uma placa heterogênea, composta por duas regiões e dois grupos de energia, espalhamento isotrópico e condições de contorno do tipo vácuo. Neste problema, considera-se uma placa plana heterogênea conforme está representado na figura 4.5. Os dados de entrada do programa são mostrados na tabela 4.7. O problema a ser resolvido é dado por:

$$\frac{d\Psi_{g,j}^r(x)}{dx} + \frac{\Sigma_{t_g}^r}{\mu_j} \Psi_{g,j}^r(x) = \sum_{g'=1}^G \frac{\chi_g}{2\mu_j K_{eff}} \sum_{i=1}^N \nu_{g'}^r \Sigma_{f_{g'}}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i + \frac{1}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \Sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i \quad (4.7)$$

com $x_{r-1} \leq x \leq x_r$, $i = 1, 2, \dots, N(par)$, $j = 1, 2, \dots, N(par)$, $r = 1, \dots, 2$, e $g = 1, \dots, 2$, sujeita às condições de contorno dadas por

$$\Psi_{g,k}(0 \text{ cm}) = 0 \quad (4.8a)$$

$$\Psi_{g,k+\frac{N}{2}}(10 \text{ cm}) = 0 \quad (4.8b)$$

com $k = 1, \dots, \frac{N}{2}$.

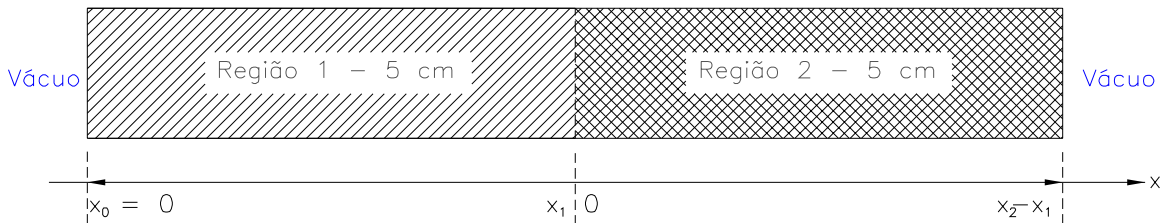


Figura 4.5 – Representação gráfica de uma placa heterogênea e condições de contorno do tipo vácuo.

O vetor $\Psi_{GN}^r(x)$, N componentes representa o fluxo angular nas N direções da região r , portanto, definido como

$$\bar{\Psi}_{GN}^r(x) = \begin{bmatrix} \Psi_{11}^r(x) \\ \vdots \\ \Psi_{1N}^r(x) \\ \vdots \\ \Psi_{G1}^r(x) \\ \vdots \\ \Psi_{GN}^r(x) \end{bmatrix}. \quad (4.9)$$

Tabela 4.7 – Parâmetros de entrada para o Problema 4.2.1a

Dados	Metade Esquerda da Placa	Metade Direita da Placa
Σ_{t1}	0,296324	0,306130
$\Sigma_{s1 \rightarrow 1}$	0,248492	0,267778
$\Sigma_{s1 \rightarrow 2}$	0,04585	0,0269096
$\nu \Sigma_{f1}$	0,00185816	0,00797127
$\nu \sigma_{f1}$	-----	1,12959E-023
χ_1	1,0	1,0
Σ_{t2}	2,22445	1,43306
$\Sigma_{s2 \rightarrow 1}$	0,000118044	0,000561166
$\Sigma_{s2 \rightarrow 2}$	2,19864	1,33531
$\nu \Sigma_{f2}$	0,0114964	0,135333
$\nu \sigma_{f2}$	-----	1,91780E-022
χ_2	0,0	0,0
Espessura cm	5,0	5,0

Os resultados obtidos para o cálculo do fator de multiplicação efetivo, K_{eff} , utilizando o método da diagonalização ($K_{eff} - diag$) está representado na tabela 4.8 e no gráfico 4.6.

Tabela 4.8 – Resultado de K_{eff} para uma placa heterogênea com espessura = 10 cm - Problema 4.2.1a

N	K_{eff}
2	0,33414999
4	0,37102899
6	0,37724128
8	0,37711487
10	0,37726413
20	0,37781711
30	0,37790130

Os resultados apresentados na tabela 4.8 mostram que para $N > 6$ existe uma concordância de três algarismos significativos. A aproximação LTS_{30} quando comparada com o valor determinado pelo código TWODANT, para $N = 48$, cujo valor é 0,37818, apresenta uma diferença relativa de 0,073695%, mostrando a validação do código desenvolvido.

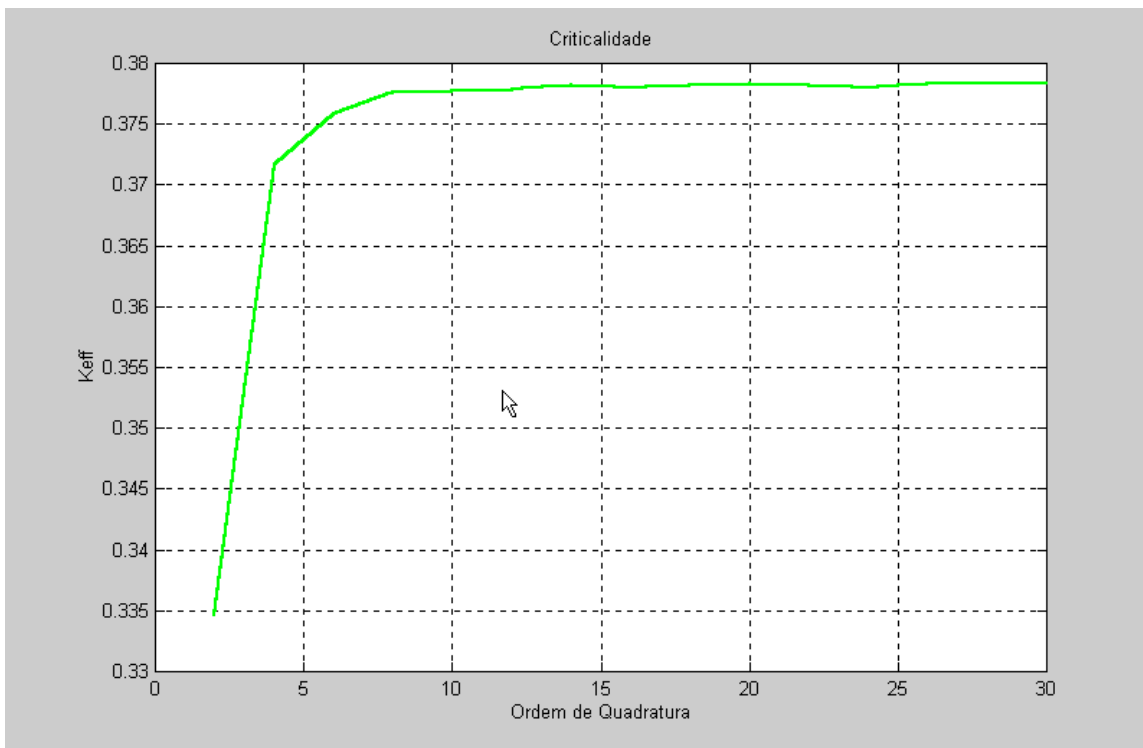


Figura 4.6 – Gráfico do K_{eff} com duas regiões de espessura de 5 cm
- Problema 4.2.1a

O comportamento da curva de K_{eff} em função da ordem de quadratura N , mostra a convergência numérica do método, pois para $N > 6$ apresenta três algarismos significativos.

Problema 4.2.1b - Cálculo da espessura para uma placa heterogênea, composta por duas regiões e dois grupos de energia e condições de contorno do tipo vácuo. Este problema é igual ao problema 4.2.1a somente que chega-se calcular a espessura da região 2, considerando $K_{eff} = 0,37790130$, de forma a verificar se reproduz o valor considerado exato (5 cm). O problema a ser resolvido é dado por:

$$\frac{d\Psi_{g,j}^r(x)}{dx} + \frac{\Sigma_{t,g}^r}{\mu_j} \Psi_{g,j}^r(x) = \sum_{g'=1}^G \frac{\chi_g}{2\mu_j K_{eff}} \sum_{i=1}^N \nu_{g'}^r \Sigma_{f,g'}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i + \frac{1}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i \quad (4.10)$$

com $x_{r-1} \leq x \leq x_r$, $i = 1, 2, \dots, N(par)$, $j = 1, 2, \dots, N(par)$, $r = 1, \dots, 2$, e $g = 1, \dots, 2$, sujeita às condições de contorno iguais das equações 4.11a e 4.11b.

$$\Psi_{g,k}(0 \text{ cm}) = 0 \quad (4.11a)$$

$$\Psi_{g,k+\frac{N}{2}}(10 \text{ cm}) = 0 \quad (4.11b)$$

com $k = 1, \dots, \frac{N}{2}$ e $K_{eff} = 0,37790130$.

Tabela 4.9 – Resultado para espessura da região 2, obtida pelo método LTS_N , para $K_{eff} = 0,37790130$ - Problema 4.2.1b

N	Espessura da Região 1	Espessura da Região 2
2	5,00000000	5,56749999
4	5,00000000	5,07209999
6	5,00000000	5,02510372
8	5,00000000	5,06274770
10	5,00000000	5,07025272
20	5,00000000	5,07209944
30	5,00000000	5,07209999

Os valores apresentados na tabela 4.9 mostram que o erro máximo relativo é de 11,35% para $N = 2$ e o menor erro relativo é de 0,5% para $N = 6$. Para $N > 6$ o valor numérico de convergência para 5,072 cm, apresentando erro relativo de 1,42%.

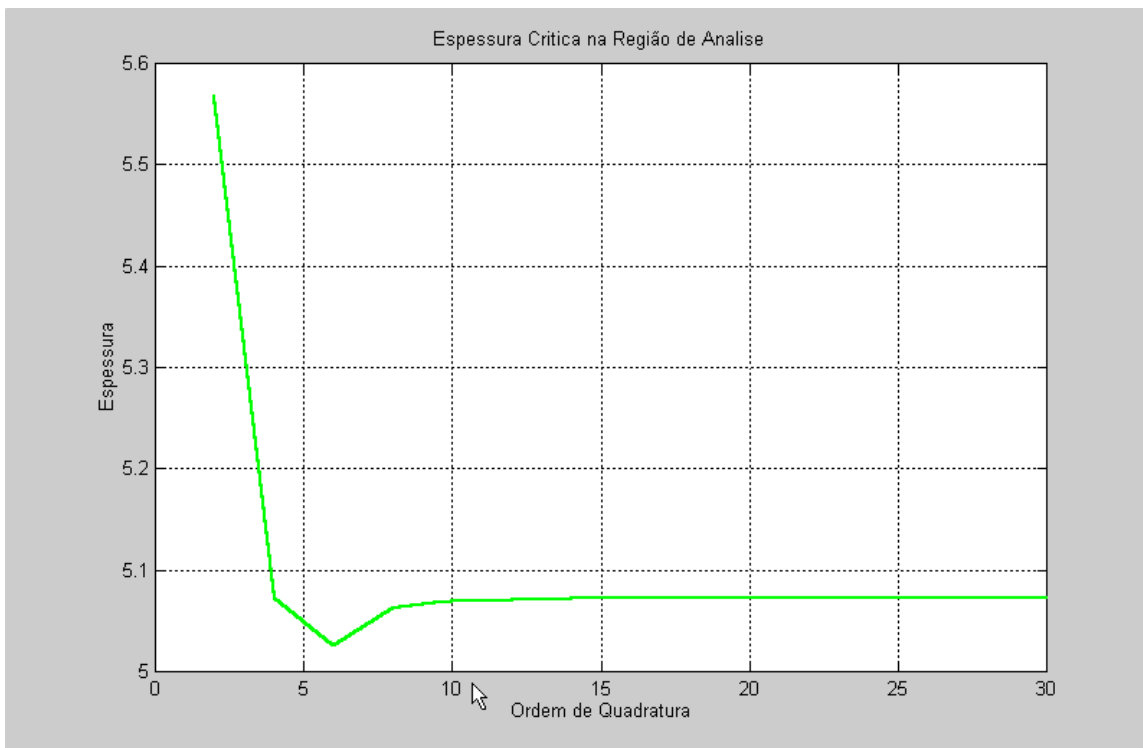


Figura 4.7 – Gráfico da espessura na região 2 com o $K_{eff} = 0,37790130$ - Problema 4.2.1b

O comportamento do gráfico apresentado na figura 4.7 mostra que a espessura da placa da região 2, converge numericamente para o valor 5,072 cm.

Problema 4.2.1c - Cálculo da concentração atômica em placa plana heterogênea, composta por duas regiões e dois grupos de energia e condições de contorno do tipo vácuo. Este problema é igual ao problema 4.2.1a, somente que deseja-se colocar a concentração atômica do material que constitui a região 2, considerando espessura de 5 cm e K_{eff} de 0,37790130, de forma a verificar se os resultados obtidos são compatíveis com os esperados. Os dados de entrada do programa são mostrados na tabela 4.7.

O problema a ser resolvido é dado por:

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi_{g,j}^r(x)}{dx} + \frac{\Sigma_{t,g}^r}{\mu_j} \Psi_{g,j}^r(x) = \sum_{g'=1}^G \frac{\chi_g n_{ff}^r}{2\mu_j K_{eff}} \sum_{i=1}^N \nu_{g'}^r \sigma_{fg'}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i + \\ \frac{1}{2\mu_j} \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^N \Sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^r \Psi_{g',i}^r(x) w_i \end{aligned} \quad (4.12)$$

com $x_{r-1} \leq x \leq x_r$, $i = 1, 2, \dots, N(par)$, $j = 1, 2, \dots, N(par)$, $r = 1, \dots, 2$, e $g = 1, \dots, 2$, sujeita às condições de contorno iguais das equações 4.13a e 4.13b.

$$\Psi_{g,k}(0 \text{ cm}) = 0 \quad (4.13a)$$

$$\Psi_{g,k+\frac{N}{2}}(10 \text{ cm}) = 0 \quad (4.13b)$$

com $k = 1, \dots, \frac{N}{2}$, $K_{eff} = 0,37790130$ e espessuras de 5 cm para cada região.

Neste exemplo a concentração atômica da metade direita da placa foi determinada para o grupo 2 (devendo ser igual para o grupo 1) obtendo-se o valor de $(8,00468499E+020[\frac{\text{átomos}}{\text{cm}^3}])$. Quando comparado com o valor considerado exato $(7,05625E+020[\frac{\text{átomos}}{\text{cm}^3}])$ verifica-se que o erro relativo é de 13,44%.

Para exemplificar o cálculo do enriquecimento do elemento combustível, vamos supor que o combustível é dióxido de urânio UO_2 . De posse das propriedades físicas do combustível nuclear, conforme tabela 4.4 e do valor da concentração atômica ($n_{ff}^2 = 8,00468499E+020[\frac{\text{núcleos}}{\text{cm}^3}]$) que foi determinada e fazendo uso da expressão 3.17 verifica-se que o enriquecimento na região 2 é de 2,47%.

Problema 4.2.1d - Determinação do fluxo escalar e da potência específica para uma placa plana heterogênea, composta por duas regiões e dois grupos em energia, conforme problema 4.2.1a e parâmetros dados na tabela 4.7.

O fluxo escalar Φ_g^r e potência foram determinados para cada grupo de energia e em cada região, em diversas posições da placa e são apresentados na tabela 4.10 e no gráfico da figura 4.8.

Os dados apresentados na tabela 4.10 mostram que o fluxo escalar total ($\Phi_1 + \Phi_2$) é máximo em ($x = 7$ cm) e a potência também é máxima na mesma posição do fluxo escalar total. Sendo que as regiões apresentam diferentes constantes nucleares, razão pela qual verifica-se o salto de potência em $x = 5$ cm, na fronteira entre as duas regiões, conforme verificado na figura 4.8

Tabela 4.10 – Resultado LTS_N da potência específica e do fluxo escalar normalizados da placa plana Heterogênea, composta por duas regiões e dois grupos de energia

Posição <i>cm</i>	Região	Φ_1 [$\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}$]	Φ_2 [$\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}$]	P_1 [watt]	P_2 [watt]
0,0	1	0,0000000000	0,0000000000	0,0000000241	0,0000000000
2,0	1	0,0762123436	0,2883676621	0,0014412626	0,0337398474
4,0	1	0,1751492821	0,5363960747	0,0033122733	0,0627598864
5,0	1	0,2267179897	0,6508329910	0,0042874965	0,0761493354
5,0	2	0,2267179897	0,6508329910	0,0183928146	0,8964126169
6,0	2	0,2658189684	0,6985825490	0,0215649363	0,9621795753
8,0	2	0,2983170085	0,6683729426	0,0242013854	0,9205709403
10,0	2	0,0000000000	0,0000000000	0,0000000000	0,0000000000

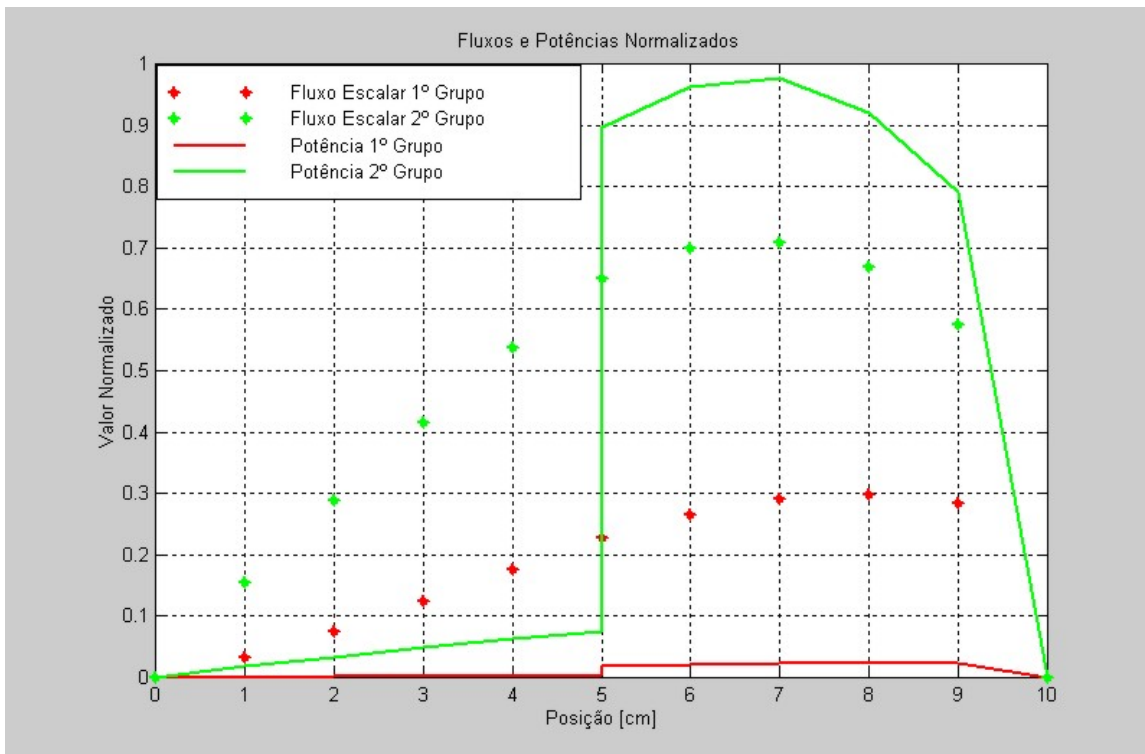


Figura 4.8 – Gráfico dos fluxos escalares Φ e das potências específicas P normalizados com o $K_{eff} = 0,37790130$ e espessura de 10 cm - Problema 4.2.1d

Na figura 4.8 pode-se verificar o comportamento do fluxo e da potência em função do grupo em energia. Na interface (5 cm), verifica-se que a potência apresenta um salto devido as diferentes regiões materiais que possuem propriedades nucleares distintas.

Problema 4.2.2a - Cálculo do fator de multiplicação efetivo, para uma placa heterogênea, composta por cinco regiões e quatro grupos de energia, espalhamento isotrópico e sujeita a condições de contorno do tipo vácuo (equações 4.8a e 4.8b). A representação esquemática da placa é mostrada na figura 4.9.

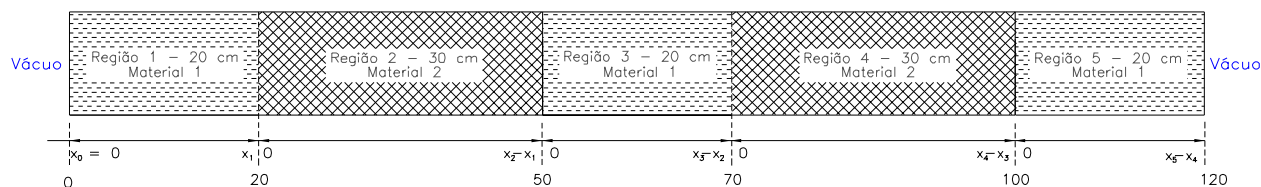


Figura 4.9 – Representação gráfica de uma placa heterogênea de 5 regiões.

As regiões 1, 3 e 5 são constituídas de material 1 e as demais regiões de material 2. As espessuras das regiões estão indicadas na figura 4.9. Os parâmetros nucleares usados como dados de entrada desse problema são mostrados na tabela 4.11.

Tabela 4.11 – Parâmetros de entrada para o Problema 4.2.2a

Dados	Região 1	Região 2	Região 3	Região 4	Região 5
Σ_{t1}	0,306105	0,222938	0,306105	0,222938	0,306105
$\Sigma_{s1 \rightarrow 1}$	0,244132	0,16094	0,244132	0,16094	0,244132
$\Sigma_{s1 \rightarrow 2}$	0,069119	0,05824	0,069119	0,05824	0,069119
$\Sigma_{s1 \rightarrow 3}$	0,0001783	0,003059	0,0001783	0,003059	0,0001783
$\nu \Sigma_{f1}$	0,0	0,0009735	0,0	0,0009735	0,0
χ_1	0,7376	0,7376	0,7376	0,7376	0,7376

Dados	Região 1	Região 2	Região 3	Região 4	Região 5
Σ_{t_2}	0,665321	0,518081	0,665321	0,518081	0,665321
$\Sigma_{s_2 \rightarrow 2}$	0,62077	0,45088	0,62077	0,45088	0,62077
$\Sigma_{s_2 \rightarrow 3}$	0,044537	0,066442	0,044537	0,066442	0,044537
$\nu \Sigma_{f_2}$	0,0	0,001153	0,0	0,001153	0,0
χ_2	0,2622	0,2622	0,2622	0,2622	0,2622
Σ_{t_3}	0,868155	0,709048	0,868155	0,709048	0,868155
$\Sigma_{s_3 \rightarrow 3}$	0,83158	0,63597	0,83158	0,63597	0,83158
$\Sigma_{s_3 \rightarrow 4}$	0,036397	0,057518	0,036397	0,057518	0,036397
$\nu \Sigma_{f_3}$	0,0	0,01756	0,0	0,01756	0,0
χ_3	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
Σ_{t_4}	1,11655	1,46011	1,11655	1,46011	1,11655
$\Sigma_{s_4 \rightarrow 3}$	0,000498	0,0006101	0,000498	0,0006101	0,000498
$\Sigma_{s_4 \rightarrow 4}$	1,1125	1,2839	1,1125	1,2839	1,1125
$\nu \Sigma_{f_4}$	0,0	0,46011	0,0	0,46011	0,0
χ_4	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
Espessura cm	20,0	30,0	20,0	30,0	20,0

Para este problema os resultados obtidos para o cálculo do fator de multiplicação efetivo, K_{eff} , utilizando o método da diagonalização ($K_{eff} - diag$) é mostrado na tabela 4.12 e no gráfico 4.10.

Tabela 4.12 – Resultado de K_{eff} para uma placa heterogênea com 5 regiões - Problema 4.2.2a

N	K_{eff}
2	1,18510000
4	1,18460000
6	1,18502208
8	1,18495618
10	1,18468197
12	1,18458806
14	1,18459959

Os resultados apresentados na tabela 4.12 mostram que existe uma concordância de quatro algoritmos significativos. A aproximação LTS_{14} quando comparada com o valor determinado pelo código ANISN, para $N = 4$, cujo valor é 1,22666, apresenta uma diferença relativa de 3,4288% comparando com os resultados obtidos por [Batistela, 1997] para LTS_{14} , cujo valor é 1,184680, apresenta uma diferença relativa de 0,006795%. Estes resultados mostram a validação do código desenvolvido.

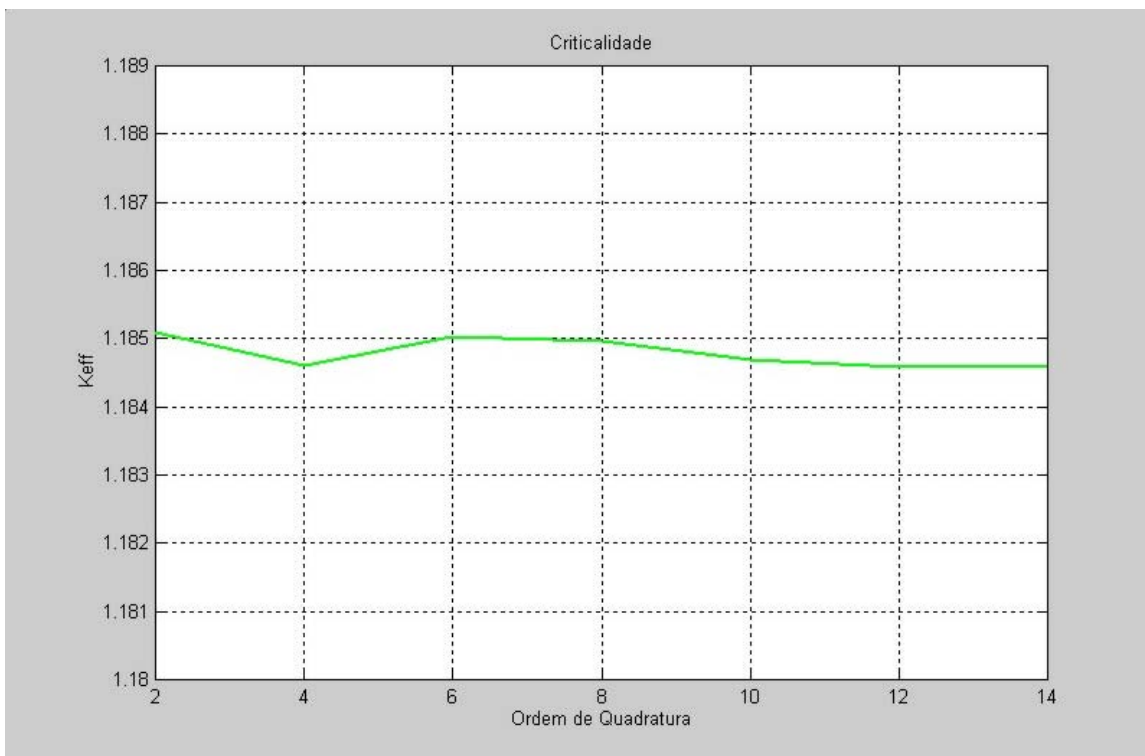


Figura 4.10 – Gráfico do K_{eff} com 5 regiões e 4 grupos - Problema 4.2.2a

O comportamento da curva de K_{eff} em função da ordem de quadratura N , mostram a convergência numérica do método, pois para $N > 8$ apresenta dois algarismos significativos.

Problema 4.2.2b - Determinação do fluxo escalar e da potência específica para uma placa plana heterogênea, composta por cinco regiões e quatro grupos em energia, conforme problema 4.2.2a e parâmetros dados na tabela 4.11.

Os fluxos escalares Φ_g^r com as respectivas potências são apresentados nas tabelas 4.13 e 4.14, e no gráfico da figura 4.11.

Tabela 4.13 – Resultado LTS_N dos fluxos escalares na placa de 5 regiões e 4 grupos de energias

Posição cm	Região	$\Phi_1 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$	$\Phi_2 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$	$\Phi_3 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$	$\Phi_4 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$
0	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
5	1	0,00955125	0,02251366	0,03617483	0,05089927
10	1	0,02268710	0,05285552	0,08307527	0,11298494
15	1	0,03681566	0,08521174	0,13234634	0,17691657
20	1	0,04620609	0,10625204	0,16305819	0,21409695
20	2	0,04620609	0,10625204	0,16305819	0,21409695
25	2	0,04238421	0,09654730	0,14552572	0,18571833
30	2	0,02275205	0,05012198	0,07064206	0,08021592
35	2	0,00697202	0,01894260	0,03720540	0,06447639
40	2	0,03169756	0,07519892	0,12158156	0,17060250
45	2	0,03783366	0,08753541	0,13533985	0,17809593
50	2	0,02180032	0,04862506	0,06993017	0,08138132
50	3	0,02180032	0,04862506	0,06993017	0,08138132
55	3	0,02422665	0,05887821	0,09940250	0,14838394
60	3	0,08237292	0,19282015	0,30542511	0,41938182
65	3	0,02422665	0,05887821	0,09940250	0,14838394
70	3	0,02180032	0,04862506	0,06993017	0,08138132
70	4	0,02180032	0,04862506	0,06993017	0,08138132
75	4	0,03783366	0,08753541	0,13533985	0,17809593
80	4	0,03169756	0,07519892	0,12158156	0,17060250

Posição cm	Região	$\Phi_1 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$	$\Phi_2 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$	$\Phi_3 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$	$\Phi_4 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2.s}]$
85	4	0,00697202	0,01894260	0,03720540	0,06447639
90	4	0,02275205	0,05012198	0,07064206	0,08021592
95	4	0,04238421	0,09654730	0,14552572	0,18571833
100	4	0,04620609	0,10625204	0,16305819	0,21409695
100	5	0,04620609	0,10625204	0,16305819	0,21409695
105	5	0,03681566	0,08521174	0,13234634	0,17691657
110	5	0,02268710	0,05285552	0,08307527	0,11298494
115	5	0,00955125	0,02251366	0,03617483	0,05089927
120	5	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000

Tabela 4.14 – Resultado LTS_N das potências específicas na placa de 5 regiões e 4 grupos de energias

Posição cm	Região	$P_1 [watt]$	$P_2 [watt]$	$P_3 [watt]$	$P_4 [watt]$
0	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
5	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
10	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
15	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
20	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
20	2	0,00044300	0,00120652	0,02819905	0,97015143
25	2	0,00040636	0,00109632	0,02516701	0,84155753
30	2	0,00021813	0,00056915	0,01221674	0,36348762

Posição <i>cm</i>	Região	P_1 [watt]	P_2 [watt]	P_3 [watt]	P_4 [watt]
35	2	0,00006684	0,00021510	0,00643425	0,29216608
40	2	0,00030390	0,00085390	0,02102614	0,77306219
45	2	0,00036273	0,00099399	0,02340548	0,80701769
50	2	0,00020901	0,00055215	0,01209362	0,36876848
50	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
55	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
60	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
65	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
70	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
70	4	0,00020901	0,00055215	0,01209362	0,36876848
75	4	0,00036273	0,00099399	0,02340548	0,80701769
80	4	0,00030390	0,00085390	0,02102614	0,77306219
85	4	0,00006684	0,00021510	0,00643425	0,29216608
90	4	0,00021813	0,00056915	0,01221674	0,36348762
95	4	0,00040636	0,00109632	0,02516701	0,84155753
100	4	0,00044300	0,00120652	0,02819905	0,97015143
100	5	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
105	5	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
110	5	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
115	5	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
120	5	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000

Os dados apresentados na tabela 4.13 mostram que o fluxo escalar total ($\Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4$) é máximo na posição central da placa ($x = 60,00$ cm) e as potências totais são máximas na posições ($x = 20,00$ cm e $x = 100,00$ cm) da placa, conforme verificado na figura 4.11

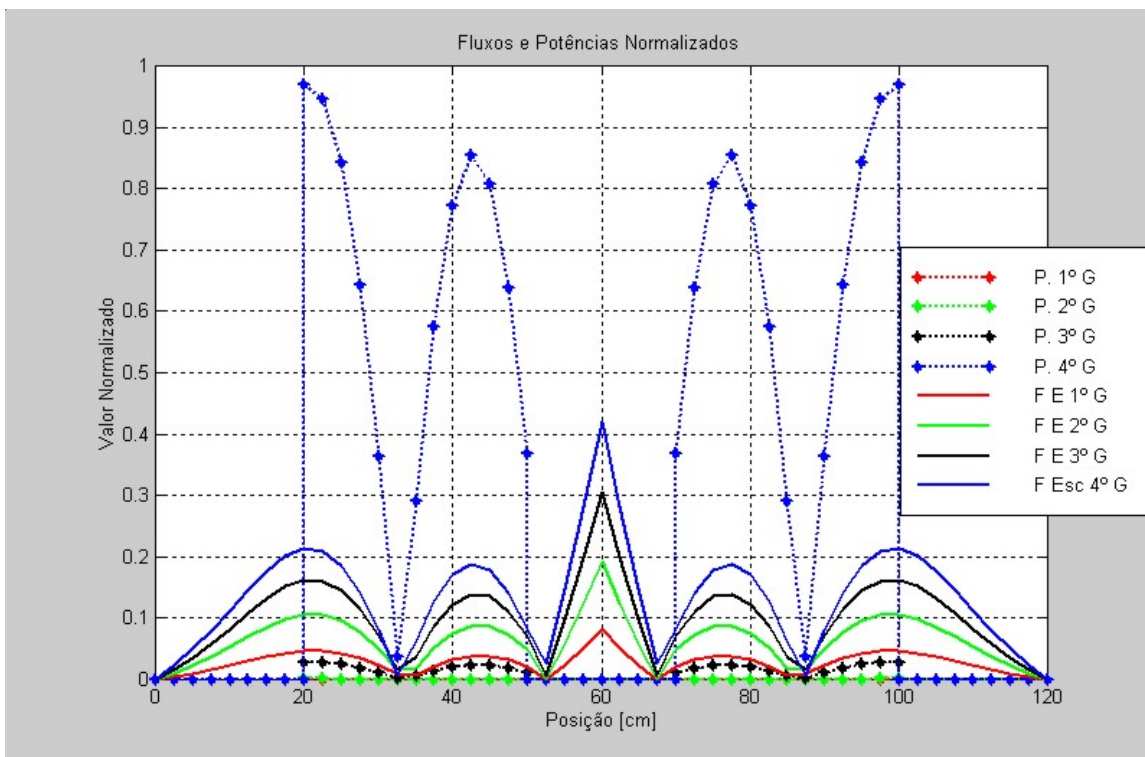


Figura 4.11 – Gráfico dos fluxos escalares Φ e das potências específicas P normalizados com o $K_{eff} = 1,18459959$ - Problema 4.2.2b

Problema 4.2.3a - Cálculo do fator de multiplicação efetivo, para uma placa heterogênea, composta por três regiões e dez grupos de energia, espalhamento isotrópico e sujeita a condições de contorno do tipo vácuo (equações 4.8a e 4.8b). Neste problema, considera-se uma placa plana heterogênea conforme está representado na figura 4.12.

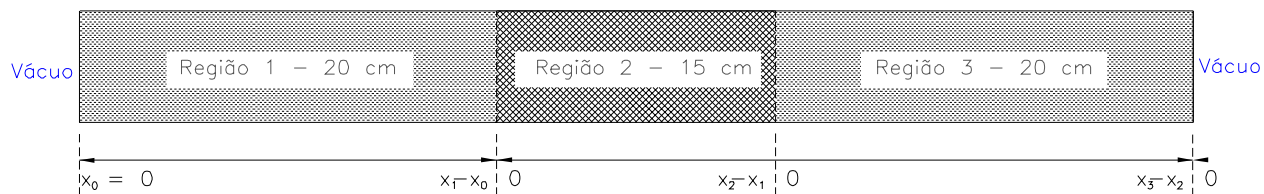


Figura 4.12 – Representação gráfica de uma placa heterogênea de 3 regiões.

Os dados de entrada do programa são mostrados na tabela 4.15 e a resolução do problema são as mesmas já utilizadas nas equações 4.7 e 4.9.

Tabela 4.15 – Parâmetros de entrada para o problema 4.2.3a

Dados	Região 1	Região 2	Região 3
Σ_{t1}	0,691908	0,2245876	0,691908
$\Sigma_{s1 \rightarrow 1}$	0,244130	0,160940	0,244130
$\Sigma_{s1 \rightarrow 2}$	0,1741	0,05824	0,1741
$\Sigma_{s1 \rightarrow 3}$	0,051	0,003059	0,051
$\Sigma_{s1 \rightarrow 4}$	0,2	0,00123	0,2
$\Sigma_{s1 \rightarrow 5}$	0,02	0,00042	0,03
$\nu \Sigma_{f1}$	0,0	0,0009735	0,0
χ_1	0,07	0,07	0,07

Dados	Região 1	Região 2	Região 3
Σ_{t_2}	1,163784	0,5529316	1,163784
$\Sigma_{s_2 \rightarrow 1}$	0,174	0,0325	0,174
$\Sigma_{s_2 \rightarrow 2}$	0,62077	0,63597	0,62077
$\Sigma_{s_2 \rightarrow 3}$	0,224	0,057518	0,224
$\Sigma_{s_2 \rightarrow 4}$	0,105	0,0021	0,105
$\Sigma_{s_2 \rightarrow 5}$	0,0	0,003	0,0
$\nu \Sigma_{f_2}$	0,0	0,001153	0,0
χ_2	0,12	0,12	0,12
Σ_{t_3}	1,146798	0,835548	1,146798
$\Sigma_{s_3 \rightarrow 2}$	0,043	0,16094	0,043
$\Sigma_{s_3 \rightarrow 3}$	0,83158	0,16094	0,83158
$\Sigma_{s_3 \rightarrow 4}$	0,152	0,16094	0,152
$\Sigma_{s_3 \rightarrow 5}$	0,09	0,16094	0,09
$\Sigma_{s_3 \rightarrow 6}$	0,003	0,16094	0,003
$\nu \Sigma_{f_3}$	0,0	0,01756	0,0
χ_3	0,12	0,12	0,12
Σ_{t_4}	1,281052	1,4625101	1,281052
$\Sigma_{s_4 \rightarrow 3}$	0,074	0,0	0,074
$\Sigma_{s_4 \rightarrow 4}$	1,1125	1,2839	1,1125
$\Sigma_{s_4 \rightarrow 5}$	0,09	0,0021	0,09
$\Sigma_{s_4 \rightarrow 6}$	0,001	0,0003	0,001
$\nu \Sigma_{f_4}$	0,0	0,238	0,0
χ_4	0,603	0,603	0,603

Dados	Região 1	Região 2	Região 3
Σ_{t5}	0,35936	0,12507	0,35936
$\Sigma_{s5 \rightarrow 4}$	0,084	0,001	0,084
$\Sigma_{s5 \rightarrow 5}$	0,19286	0,07421	0,19286
$\Sigma_{s5 \rightarrow 6}$	0,0484	0,02176	0,0484
$\Sigma_{s5 \rightarrow 7}$	0,01	0,0045	0,01
$\Sigma_{s5 \rightarrow 8}$	0,0	0,0021	0,0
$\nu \Sigma_{f5}$	0,0	0,00081	0,0
χ_5	0,0017	0,0017	0,0017
Σ_{t6}	0,2932	0,26377	0,2932
$\Sigma_{s6 \rightarrow 5}$	0,0758	0,01980	0,0758
$\Sigma_{s6 \rightarrow 6}$	0,11588	0,2019	0,11588
$\Sigma_{s6 \rightarrow 7}$	0,0751	0,02857	0,0751
$\Sigma_{s6 \rightarrow 8}$	0,02	0,0104	0,02
$\nu \Sigma_{f6}$	0,0	0,0035	0,0
χ_6	0,001	0,001	0,001
Σ_{t7}	0,52023	0,644427	0,52023
$\Sigma_{s7 \rightarrow 6}$	0,024	0,1743	0,024
$\Sigma_{s7 \rightarrow 7}$	0,3571	0,3689	0,3571
$\Sigma_{s7 \rightarrow 8}$	0,123	0,046377	0,123
$\Sigma_{s7 \rightarrow 9}$	0,007	0,0444	0,007
$\Sigma_{s7 \rightarrow 10}$	0,0	0,01	0,0
$\nu \Sigma_{f7}$	0,0	0,0123	0,0
χ_7	0,0006	0,0006	0,0006

Dados	Região 1	Região 2	Região 3
Σ_{t8}	0,716520	0,8241506	0,716520
$\Sigma_{s8 \rightarrow 7}$	0,077	0,0004426	0,077
$\Sigma_{s8 \rightarrow 8}$	0,4542	0,30826	0,4542
$\Sigma_{s8 \rightarrow 9}$	0,179	0,007038	0,179
$\Sigma_{s8 \rightarrow 10}$	0,005	0,5011	0,005
$\nu \Sigma_{f8}$	0,0	0,024	0,0
χ_8	0,0004	0,0004	0,0004
Σ_{t9}	0,43845	0,28768	0,43845
$\Sigma_{s9 \rightarrow 8}$	0,065	0,0938	0,065
$\Sigma_{s9 \rightarrow 9}$	0,2742	0,1271	0,2742
$\Sigma_{s9 \rightarrow 10}$	0,0987	0,04561	0,0987
$\nu \Sigma_{f9}$	0,0	0,005	0,0
χ_9	0,0013	0,0013	0,0013
Σ_{t10}	0,07911	0,0	0,07911
$\Sigma_{s10 \rightarrow 9}$	0,004	0,000201	0,004
$\Sigma_{s10 \rightarrow 10}$	0,0721	0,19296	0,0721
$\nu \Sigma_{f10}$	0,0	0,0009	0,0
χ_{10}	0,0	0,0	0,0

Neste problema os resultados obtidos para o cálculo do fator de multiplicação efetivo, K_{eff} , utilizando o método da diagonalização ($K_{eff} - diag$) está representado na tabela 4.16 e no gráfico 4.13.

Tabela 4.16 – Resultado de K_{eff} para uma placa heterogênea com 3 regiões - Problema 4.2.3a

N	K_{eff}
2	1,07590000
4	1,07539000
6	1,07575760
8	1,07552080
10	1,07543740
12	1,07537013
14	1,07537222

Os resultados apresentados na tabela 4.16 mostram que a partir de $N > 2$ existe uma concordância de 3 casas decimais e para $N > 12$ existe uma concordância de cinco algarismos significativos. A aproximação LTS_{12} quando comparada com o valor determinada pelo código ANISN, para $N = 12$, cujo valor é 1,09386, apresenta uma diferença relativa de 1,690141%. Comparando a aproximação LTS_8 , com a obtida por [Batistela, 1997], para uma mesma ordem de quadratura, cujo valor é 1,096068, a diferença é de 1,9441%. Esses resultados mostram a eficiência do código desenvolvido.

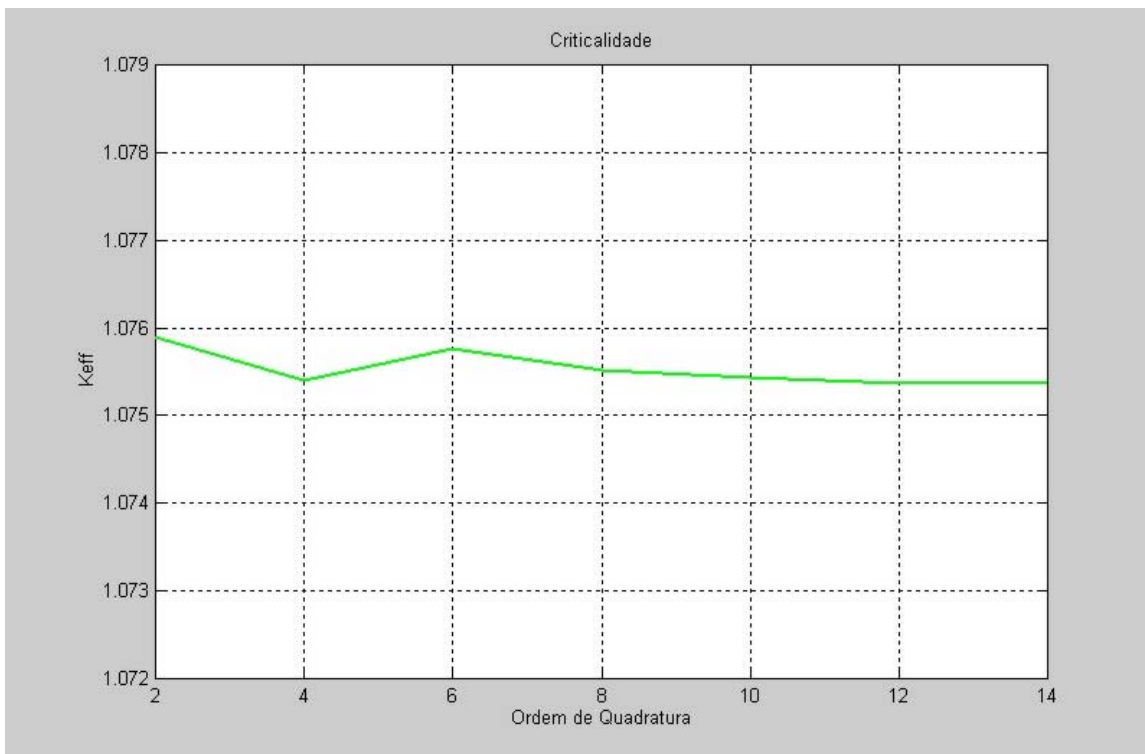


Figura 4.13 – Gráfico do K_{eff} com 3 regiões e 10 grupos - Problema 4.2.3a

Problema 4.2.3b - Determinação do fluxo escalar e da potência específica para uma placa plana heterogênea, composta por três regiões e dez grupos em energia, conforme problema 4.2.3a e parâmetros dados na tabela 4.15.

Os fluxos escalares Φ_g^r e as potências são apresentados nas tabelas 4.17 e 4.18 e no gráfico das figuras 4.14 e 4.15.

Tabela 4.17 – Resultado LTS_N dos fluxos escalares na placa de 3 regiões e 10 grupos de energias

Pos.cm	Reg.	$\Phi_1 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}]$	$\Phi_2 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}]$	$\Phi_3 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}]$	$\Phi_4 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}]$	$\Phi_5 [\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}]$
0,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
5,00	1	0,00035551	0,00082582	0,00129094	0,00174147	0,00216079
10,00	1	0,00081308	0,00187489	0,00289376	0,00383797	0,00467208
15,00	1	0,00167968	0,00387480	0,00598693	0,00795863	0,00972951
20,00	1	0,01056509	0,02480621	0,03963099	0,05552425	0,07336540
20,00	2	0,01056509	0,02480621	0,03963099	0,05552425	0,07336540
25,00	2	0,01753247	0,03976452	0,06218541	0,08138551	0,09364765
30,00	2	0,01753247	0,03976452	0,06218541	0,08138551	0,09364765
35,00	2	0,01056509	0,02480621	0,03963099	0,05552425	0,07336540
35,00	3	0,01056509	0,02480621	0,03963099	0,05552425	0,07336540
40,00	3	0,00167968	0,00387480	0,00598693	0,00795863	0,00972951
45,00	3	0,00081308	0,00187489	0,00289376	0,00383797	0,00467208
50,00	3	0,00035551	0,00082582	0,00129094	0,00174147	0,00216079
55,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000

Pos.cm	Reg.	Φ_6 [$\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}$]	Φ_7 [$\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}$]	Φ_8 [$\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}$]	Φ_9 [$\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}$]	Φ_{10} [$\frac{n\acute{e}utrons}{cm^2 \cdot s}$]
0,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
5,00	1	0,00252320	0,00279827	0,00295593	0,00296928	0,00281794
10,00	1	0,00535612	0,00584697	0,00610062	0,00607570	0,00573995
15,00	1	0,01123364	0,01240234	0,01317539	0,01354834	0,01365562
20,00	1	0,09501975	0,12603529	0,17332480	0,15891619	0,11810966
20,00	2	0,09501975	0,12603529	0,17332480	0,15891619	0,11810966
25,00	2	0,08892187	0,04464151	0,03431068	0,07933758	0,08409170
30,00	2	0,08892187	0,04464151	0,03431068	0,07933758	0,08409170
35,00	2	0,09501975	0,12603529	0,17332480	0,15891619	0,11810966
35,00	3	0,09501975	0,12603529	0,17332480	0,15891619	0,11810966
40,00	3	0,01123364	0,01240234	0,01317539	0,01354834	0,01365562
45,00	3	0,00535612	0,00584697	0,00610062	0,00607570	0,00573995
50,00	3	0,00252320	0,00279827	0,00295593	0,00296928	0,00281794
55,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000

Tabela 4.18 – Resultado LTS_N das potências específicas na placa de
3 Regiões e 10 grupos de energias

Posição <i>cm</i>	Região	P_1 [watt]	P_2 [watt]	P_3 [watt]	P_4 [watt]	P_5 [watt]
0,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
5,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
10,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
15,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
20,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
20,00	2	0,00031587	0,00087839	0,02137270	0,40584436	0,00182506
25,00	2	0,00052418	0,00140807	0,03353612	0,59487246	0,00232960
30,00	2	0,00052418	0,00140807	0,03353612	0,59487246	0,00232960
35,00	2	0,00031587	0,00087839	0,02137270	0,40584436	0,00182506
35,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
40,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
45,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
50,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
55,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000

Posição <i>cm</i>	Região	P_6 [watt]	P_7 [watt]	P_8 [watt]	P_9 [watt]	P_{10} [watt]
0,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
5,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
10,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
15,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
20,00	1	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
20,00	2	0,01021367	0,04760988	0,12775320	0,02440270	0,00326458
25,00	2	0,00955821	0,01686335	0,02528951	0,01218285	0,00232432
30,00	2	0,00955821	0,01686335	0,02528951	0,01218285	0,00232432
35,00	2	0,01021367	0,04760988	0,12775320	0,02440270	0,00326458
35,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
40,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
45,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
50,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000
55,00	3	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000	0,00000000

Tabela 4.19 – Resultado LTS_N dos fluxos escalares e das potências totais na placa de 3 Regiões.

Posição cm	Região	Φ_{Total}	P_{Total}
0,00	1	0,00000000	0,00000000
5,00	1	0,02043916	0,00000000
10,00	1	0,04321115	0,00000000
15,00	1	0,09324488	0,00000000
20,00	1	0,87529764	0,00000000
20,00	2	0,87529764	0,64348041
22,50	2	1,00000000	1,00000000
25,00	2	0,62581890	0,69888866
27,50	2	0,72499507	0,27117581
30,00	2	0,62581890	0,69888866
32,50	2	1,00000000	1,00000000
35,00	2	0,87529764	0,64348041
35,00	2	0,87529764	0,00000000
40,00	2	0,09324488	0,00000000
45,00	2	0,04321115	0,00000000
50,00	3	0,02043916	0,00000000
55,00	3	0,00000000	0,00000000

Os dados apresentados na tabela 4.19 mostram que o fluxo escalar total ($\Phi_{Total} = \Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + \Phi_4 + \Phi_5 + \Phi_6 + \Phi_7 + \Phi_8 + \Phi_9 + \Phi_{10}$) e a potência total são máximas nas posições ($x = 22,5$ cm e $x = 32,5$ cm) da placa, conforme verificado nas figuras 4.14 e 4.15

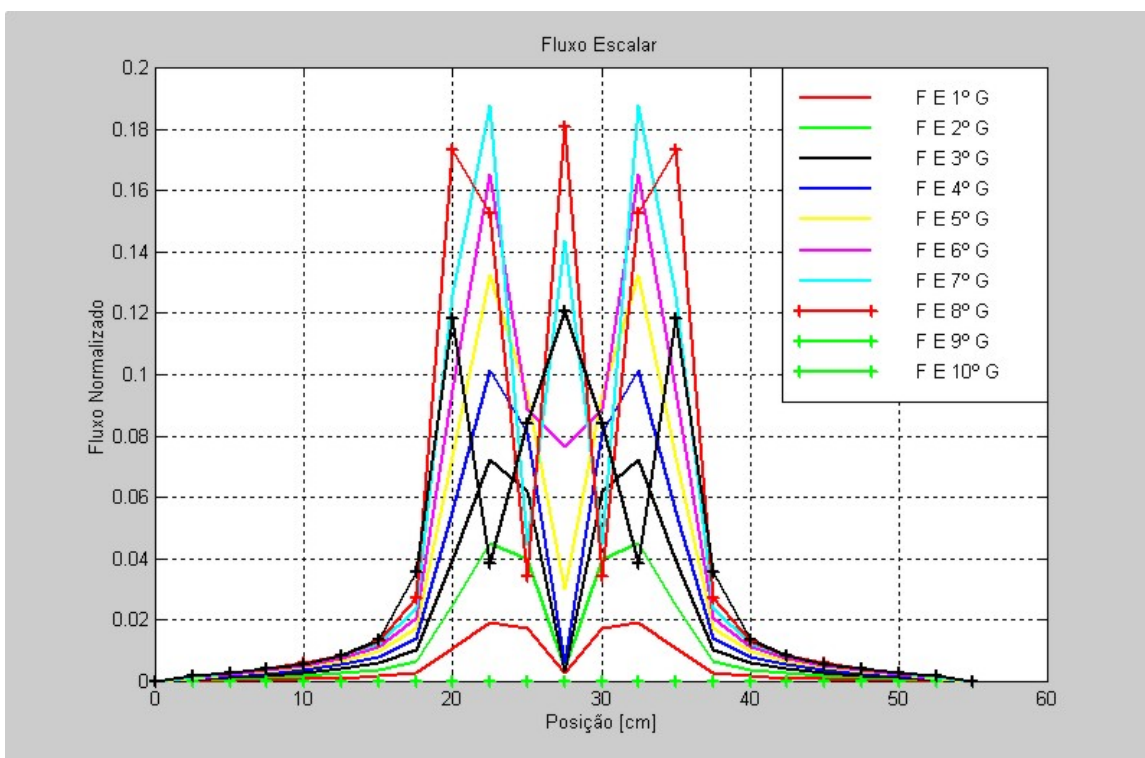


Figura 4.14 – Gráfico dos fluxos escalares Φ normalizados com o $K_{eff} = 1,07537222$ - Problema 4.2.3b

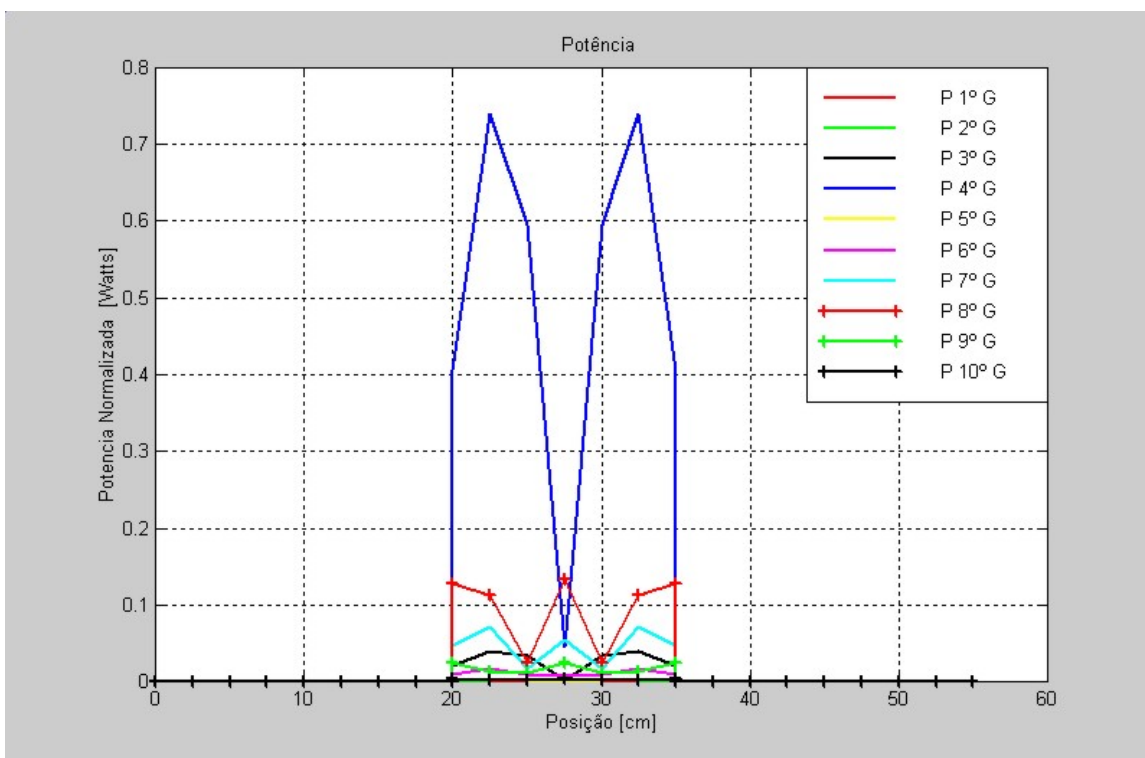


Figura 4.15 – Gráfico das potências específicas P normalizadas com o $K_{eff} = 1,07537222$ - Problema 4.2.3b

CONCLUSÃO

A análise dos resultados obtidos permite concluir que a metodologia proposta, além de ser utilizado no cálculo de parâmetros críticos como K_{eff} , espessura crítica e concentrações atômicas, reduzindo a solução de um problema de autovalores à solução de uma equação transcendental, pode ser usada como ferramenta útil na determinação dos fluxos escalares, do enriquecimento atômico e da potência específica. Os resultados dos parâmetros críticos mostraram-se em concordância com os valores obtidos nos trabalhos de dissertações e teses já realizadas anteriormente [Batistela, 1997], [Derivi, 1999] e os obtidos por códigos, cuja validação já foram comprovadas, como o ANISN e TWODANT. O método da diagonalização mostrou-se eficiente, apesar de ter alcançado uma ordem de quadratura de até ($N=30$), sendo que a partir desta ordem não mantém melhor rendimento devido aos erros de "overflow". Na comparação dos resultados obtidos de K_{eff} , da espessura crítica, os resultados obtidos para LTS_{20} e LTS_{30} quanto ao aspecto de precisão, obtém-se com 4 casas decimais, revelando que o método LTS_N é eficiente, mesmo para baixas ordens de quadratura. Diante dos resultados obtidos, tanto para problemas homogêneos como heterogêneos, pode-se concluir que o método LTS_N pode ser usado para determinação de parâmetros de criticalidade, fluxo e potência de placas planas unidimensionais, apresentando as características de ser um método simples e eficiente além de uma ferramenta útil para o desenvolvimento de um programa computacional para cálculo dessas grandezas, permitindo a extensão dos problemas para diversas regiões e grupos de energia, o que irá aumentar o tempo computacional, tendo a vantagem de se controlar o valor da ordem de quadratura.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Barichello, L. and Vilhena, M., 1993. "A General Approach to One Group One Dimensional Transport Equation", **Kerntechnik**, vol. 58, pp. 182–184.

Barichello, L. B., 1992. "**Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenada Discreta Unidimensional**", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Barros, R. C. and Larsen, E., 1990. "A Numerical Method for one-group slab-geometry discrete ordinates problems with no spacial truncation error", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 140, pp. 190–208.

Batistela, C. H. F., 1997. "**Estudo de Criticalidade pelo Método LTS_N** ", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Batistela, C. H. F., V. M. and Borges, 1997. "Criticality by the LTS_N Method", **Journal of Nuclear Science and Techonoly**, vol. 34(6), pp. 603–606.

Batistela, C. H. F., V. M. and Borges, 1998. "Determination of the effective multiplication factor in a slab by the LTS_N Method", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 26, pp. 761–767.

Bell, G. and Glasstone, S., 1970. "**Nuclear Reactor Theory**". Litton Educational Publishing, Inc., New York.

Case, K. and Zweifel, P., 1967. "**Linear Transport Theory**". Addison-Wesley Publishing, Company, Inc., New York.

Derivi, A. G., 1999. "**Código Computacional para Cálculos de Criticalidade em Placas Planas pelo Método LTS_N** ", Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Duderstadt, J. and Martin, W., 1979. "**Transport Theory**". John Wiley & Sons, Inc., New York.

El-Wakil, M., 1971. "**Nuclear Heat Transport**". American Nuclear Society., New York.

Henry, A., 1975. "**Nuclear-Reactor Analysis**". The MIT Press, New York.

Oliveira, J. V. P., 1993. "**Formulação LTS_N para o Problema de Ordenada Discreta com Anisotropia**", Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Schilling, R. and Lee, H., 1988. "**Engineering Analysis - A Vector Space Approach**". John Wiley & Sons, Inc., New York.

Sensonske, A. and Glasstone, S., 1967. "**Nuclear Reactor Engineering**". Van Nostrand Reinhold., New York.

Siewert, E. C. and Benoist, P., 1979. "The F_N Method in Neutron Transport Theory - Part I: Theory and Applications", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 69, pp. 156–160.

Spanier, J. and Gelbard, E., 1969. "**Monte Carlo principles and neutrons transport problems**". Addison-Wesley Publishing, Company, Inc., New York.

Vilhena, M. and Barichello, L., 1995. "An Analytical solution for Multigroup Slab Geometry Discrete Ordinates Problem", **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 24, pp. 1337.

Zabadal, J., 1994. "**Solução Analítica da Equação de Ordenadas Discretas Multidimensional**", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Zabadal, J., Vilhena, M. T. M. B., and Barichello, L. B., 1995. "An Analytical Solution for the Two-Dimensional Discrete Ordinate Problem In a Convex Domain", **Progress in Nuclear Energy**.

Zabadal, J., V. M. and Barichello, L., 1993. "Solução da Equação de Ordenada Discreta em Duas Dimensões pelo Método LTS_N ", **Anais do IX ENFIR- Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica**, pages 90–92. Caxambu, MG.

Zabadal, J., V. M. and Barichello, L., 1995. "Solution For Two-Dimensional One Group Discrete Ordinates Problem by the LTS_N Method", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 22(2), pp. 131–134.