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

SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO CINÉTICA DE DIFUSÃO MULTIGRUPO DE NÊUTRONS EM GEOMETRIA CARTESIANA UNIDIMENSIONAL PELA TÉCNICA DA TRANSFORMADA INTEGRAL

por

Celina Ceolin

Dissertação para obtenção do Título de Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2010

SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO CINÉTICA DE DIFUSÃO MULTIGRUPO DE NÊUTRONS EM GEOMETRIA CARTESIANA UNIDIMENSIONAL PELA TÉCNICA DA TRANSFORMADA INTEGRAL

por

Celina Ceolin

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. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite

Aprovada por:

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

Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Rubem Figueró Vargas (PUCRS/RS)

Prof. Dr. Horácio Antonio Vielmo Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 29 de Janeiro de 2010

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao professor Marco Tullio M. B. de Vilhena pelo conhecimento transmitido e pela valiosa orientação prestada.

A minha família, especialmente aos meus pais, que sempre me apoiaram e incentivaram.

A CNEN pelo suporte financeiro e ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes.

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

RESUMO

SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO CINÉTICA DE DIFUSÃO MULTIGRUPO DE NÊUTRONS EM GEOMETRIA CARTESIANA UNIDIMENSIONAL PELA TÉCNICA DA TRANSFORMADA INTEGRAL

O objetivo deste trabalho consiste na obtenção de uma solução analítica para a equação cinética de difusão de nêutrons unidimensional e em geometria cartesiana, para problemas monoenergéticos e com multigrupos de energia. Essas equações são do tipo *stiff*, devido às amplas diferenças nas ordens de grandeza das escalas de tempo dos fenômenos físicos envolvidos, fato que as torna de difícil solução. A idéia básica do método proposto consiste na aplicação da expansão espectral do fluxo escalar espacial e da concentração de precursores, aplicação de momentos e solução de problema matricial resultante pela técnica da transformada de Laplace. Tendo em vista que a equação para a concentração de precursores é uma equação diferencial linear de primeira ordem na variável temporal, para tornar possível a aplicação do método espectral, foi introduzido um termo de difusão fictícia multiplicado por um valor ε pequeno e positivo. Por esse procedimento, foi possível encontrar uma solução analítica para o problema estudado. Foram realizadas simulações numéricas e análise dos resultados obtidos com a precisão controlada pela ordem de truncamento da série.

Autor: Celina Ceolin Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena Co-Orientador: Prof. Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA Dissertação de Mestrado em Engenharia Porto Alegre, Janeiro de 2010.

ABSTRACT

ANALYTICAL SOLUTION OF THE MULTIGROUP NEUTRON DIFFUSION KINETIC EQUATION IN ONE-DIMENSIONAL CARTESIAN GEOMETRY BY THE INTEGRAL TRANSFORM TECHNIQUE.

The objective of this work is to obtain an analytical solution of the neutron diffusion kinetic equation in one-dimensional cartesian geometry, to monoenergetic and multigroup problems. These equations are of the type *stiff*, due to large differences in the orders of magnitude of the time scales of the physical phenomena involved, which make them difficult to solve. The basic idea of the proposed method is applying the spectral expansion in the scalar flux and in the precursor concentration, taking moments and solving the resulting matrix problem by the Laplace transform technique. Bearing in mind that the equation for the precursor concentration is a first order linear differential equation in the time variable, to enable the application of the spectral method we introduce a fictitious diffusion term multiplied by a positive value which tends to zero. This procedure opened the possibility to find an analytical solution to the problem studied. We report numerical simulations and analysis of the results obtained with the precision controlled by the truncation order of the series.

Author: Celina Ceolin Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena Co-Orientador: Prof. Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA Dissertação de Mestrado em Engenharia Porto Alegre, Janeiro de 2010.

ÍNDICE

1	INT	RODUÇÃO	1
2	FO	RMULAÇÃO DA CINÉTICA DE REATORES - MODELOS FÍSICOS	5
	2.1	Modelo do transporte de partículas	5
	2.2	Modelo da difusão de nêutrons	8
	2.3	Modelo da difusão considerando os nêutrons atrasados	10
3	os	MÉTODOS UTILIZADOS: TRANSFORMADAS INTEGRAIS	14
	3.1	A Técnica da Transformada Integral Generalizada: GITT	14
	3.2	Solução do sistema de EDO's transformado	16
4	AP	LICAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA	20
	4.1	Caso 1: monoenergético com 1 grupo de nêutrons atrasados	20
		4.1.1 Resultados	25
	4.2	Caso 2: multigrupos de energia com 6 grupos de nêutrons atrasados	27
		4.2.1 Resultados	35
5	CO	NCLUSÃO	43
R	EFE]	RÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	44

LISTA DE SÍMBOLOS

1. Caracteres Arábicos

- A operador diferencial parcial genérico (Capítulo 3)
- A número de massa atômica do meio (Capítulo 2)
- *B* operador diferencial genérico
- C_i concentração do precursor do i-ésimo grupo $[cm^{-2}s^{-1}]$
- D coeficiente de difusão [cm]
- D_g matriz diagonal dos autovalores
- E energia dos nêutrons [MeV]
- F matriz de coeficientes do problema transformado genérico
- *G* matriz de coeficientes do problema transformado genérico
- *H* matriz de coeficientes do problema transformado genérico
- *I* matriz identidade
- **J** corrente de nêutrons $[cm^{-2}s^{-1}]$
- *L* operador diferencial associado ao problema de Sturm-Liouville genérico
- \mathcal{L} operador da transformada de Laplace
- N ordem de truncamento da série
- N_m quadrado da norma de L
- \mathbf{r} vetor posição espacial [cm]
- S fonte externa de nêutrons $[cm^{-2}s^{-1}]$
- s variável independente da transformada de Laplace
- t variável temporal [t]
- v velocidade dos nêutrons [cm/s]
- y(x) função qualquer do problema transformado genérico
- Y matriz dos autovetores
- Y^{-1} inversa da matriz dos autovetores

2. Caracteres Gregos

β	fração total de nêutrons atrasados
β_i	fração de nêutrons atrasados para o i-ésimo grupo
γ_n	autovalores do problema de Sturm-Liouville
ε	parâmetro relacionado ao termo de difusão fictícia
λ_i	constante de decaimento do precursor do i-ésimo grupo $[s^{-1}]$
λ_m	autovalores do operador L
λ_{tr}	livre caminho médio de transporte $[cm]$
$ar{\mu}$	cosseno do ângulo de espalhamento
ν	número médio de nêutrons emitidos na fissão
$\nu(x,t)$	função do problema genérico
$\xi_n(t)$	coeficientes da expansão da solução para a concentração de precursores
Σ_a	seção de choque macroscópica de absorção $[cm^{-1}]$
Σ_f	seção de choque macroscópica de fissão $[cm^{-1}]$
Σ_R	seção de choque macroscópica de remoção $[cm^{-1}]$
Σ_s	seção de choque macroscópica de espalhamento $[cm^{-1}]$
Σ_{s21}	seção de choque de espalhamento do grupo 2 para o grupo 1 $[cm^{-1}]$
Σ_{s12}	seção de choque de espalhamento do grupo 1 para o grupo 2 $[cm^{-1}]$
Σ_t	seção de choque macroscópica total $[cm^{-1}]$
Σ_{tr}	seção de choque macroscópica de transporte $[cm^{-1}]$
ϕ	fluxo escalar de nêutrons $[cm^{-2}s^{-1}]$
φ	fluxo angular de nêutrons $[cm^{-2}s^{-1}]$
$\varphi_n(t)$	coeficientes da expansão da solução para o fluxo de nêutrons
χ	espectro de fissão
$\chi(x)$	autofunções do problema de Sturm-Liouville
χ^p_g	espectro de fissão dos nêutrons prontos para o grupo g
χ_g^d	espectro de fissão dos nêutrons atrasados para o grupo g
Ψ_m	autofunções do operador L
$\hat{\Omega}$	é o vetor unitário da direção das partículas

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1	Seção de choque de fissão para o Urânio-235 (fonte: Agência Internacional de	
	Energia Atômica).	7
4.1	Geometria do problema	25
4.2	Solução da equação da difusão em estado estacionário	26
4.3	Gráfico do fluxo de nêutrons para diferentes tempos	28
4.4	Gráfico 3-D para o fluxo de nêutrons	28
4.5	Gráfico 3-D para a concentração de precursores	29
4.6	Tempo computacional	29
4.7	Solução da equação da difusão em estado estacionário para o grupo rápido. \ldots	36
4.8	Solução da equação da difusão em estado estacionário para o grupo térmico. $% \left({{{\rm{s}}} \right)$.	36
4.9	Gráfico do fluxo de nêutrons rápidos para diferentes tempos	39
4.10	Gráfico do fluxo de nêutrons térmicos para diferentes tempos	40
4.11	Gráfico 3-D para o fluxo de nêutrons rápidos	40
4.12	Gráfico 3-D para o fluxo de nêutrons térmicos	41
4.13	Gráfico 3-D para a concentração de precursores	41
4.14	Tempo computacional.	42

ÍNDICE DE TABELAS

2.1	Constantes referentes ao Urânio-235	11
4.1	Parâmetros nucleares - caso 1 [Oliveira et al., 2007]	25
4.2	Convergência do fluxo de nêutrons com a diminuição do valor de ε	26
4.3	Convergência do fluxo de nêutrons com o aumento do valor de N	27
4.4	Parâmetros nucleares - caso 2 [Nagaya e Kobayashi, 1995]	35
4.5	Parâmetros referentes aos nêutrons atrasados [Nagaya e Kobayashi, 1995]	35
4.6	Convergência do fluxo para o grupo de nêutrons rápidos com a diminuição do	
	valor de ε .	37
4.7	Convergência do fluxo para o grupo de nêutrons térmicos com a diminuição	
	do valor de ε	37
4.8	Convergência do fluxo de nêutrons para o grupo rápido com o aumento do	
	valor de N	38
4.9	Convergência do fluxo de nêutrons para o grupo térmico com o aumento do	
	valor de N	38

1. INTRODUÇÃO

O constante crescimento da demanda mundial por energia e os esforços para garantir o seu suprimento, juntamente com o problema do aquecimento global, têm propiciado e impulsionado o desenvolvimento da indústria e da pesquisa na área nuclear no Brasil. Um dos principais enfoques da pesquisa na área nuclear é o estudo da evolução da população de nêutrons em sistemas nucleares, o que é um grande desafio tanto físico quanto matemático e constitui um problema crucial no estudo e na análise de reatores. Nesse contexto, é de extrema importância a determinação e o acompanhamento do comportamento dessa população perante variações induzidas por mudanças na criticalidade do reator. O modelo físicomatemático que fornece a descrição desses fenômenos é o modelo da cinética de reatores nucleares, que envolve a equação da difusão de nêutrons incluindo os nêutrons atrasados, que são gerados pelo decaimento dos produtos da fissão. Mesmo representando menos de 1% do total de nêutrons produzidos na fissão, os nêutrons atrasados desempenham um importante papel principalmente na área de segurança, pois retardam a resposta do reator a uma determinada perturbação, condição que facilita o controle de um reator nuclear.

Do ponto de vista matemático, as equações de cinética são conhecidas como sendo do tipo *stiff*, devido às amplas diferenças nas ordens de grandeza das escalas de tempo dos fenômenos físicos envolvidos. Por exemplo, as constantes de decaimento dos precursores de nêutrons atrasados são muito menores do que as constantes do tempo características da moderação dos nêutrons ou mesmo do processo de difusão. Fato que as torna de difícil solução.

Um modelo simplificado é a chamada aproximação da cinética pontual, que assume que o fluxo de nêutrons tem uma distribuição espacial fixa no tempo, fazendo com que sua validade fique limitada a reatores muito pequenos onde a distribuição espacial não é sensível a mudanças locais nas propriedades do reator. Como essas mudanças ocorrem e são fundamentais, o modelo torna-se inadequado pra determinados tipos de situações. Yasinsky e Henry [Yasinsky e Henry, 1965] demonstraram a inadequabilidade desse modelo em certos

1 Introdução

casos e a necessidade de métodos e modelos mais sofisticados, o que na época despertou o interesse para a questão dos problemas de cinética com dependência espacial. Desde então, foram feitas muitas análises comparativas entre a cinética pontual e aproximações espaciais, o que proporcionou uma melhor compreensão da aplicabilidade de cada modelo.

Um dos primeiros trabalhos a se dedicar à cinética de reatores é o livro de Keepin [Keepin, 1965]. A partir daí, uma grande variedade de métodos têm sido desenvolvidos para a solução desse tipo de problema. Dentre os métodos numéricos que vem sendo utilizados podemos citar o método quase-estático [Ott e Madell, 1966] [Dulla et al., 2008]. Nesse tipo de método, a densidade de nêutrons é tratada como o produto de uma função amplitude, que é dependente somente do tempo e é determinada usando escalas de tempo curtas, e uma função forma, que é dependente de todas variáveis incluindo o tempo e é resolvida considerando escalas de tempo longas. Podemos citar também os métodos modais [Stacey, 1967] [Lima et al., 2009] e nodais [Grossman e Hennart, 2007], que tratam a parte espacial separadamente, trabalhando a parte temporal por amplitudes modais, método modal, ou pelas constantes de acoplamento nodais, método nodal. Métodos numéricos e analíticos foram resumidos numa revisão feita por Kaplan et al. [Kaplan et al., 1964], e mais recentemente, Sutton e Aviles [Sutton e Aviles, 1996] publicaram uma revisão sobre os métodos utilizados para cálculos em cinética espacial.

Uma atenção especial tem sido dedicada aos métodos analíticos devido à sua importância como referência no desenvolvimento e qualificação, tanto de códigos numéricos como dos modelos físicos utilizados, pois além de verificar se as equações são corretamente resolvidas pelos algoritmos numéricos, esse tipo de solução permite separar os efeitos numericamente induzidos daqueles causados pelo próprio modelo, além de determinar as suas limitações [Dulla et al., 2007]. O projeto em análise analítica e experimental de benchmarks para sistemas do tipo ADS [Ait-Abderrahim e Stanculescu, 2006] [Maiorino et al., 2007], tem dado motivação aos pesquisadores para concentrar sua atenção na tarefa de buscar soluções analíticas para a equação de cinética de nêutrons. Historicamente, citando Oliveira [Oliveira, 2008], o trabalho feito por Case et al. [Case et al., 1953] pode ser considerado o primeiro *benchmark* analítico em teoria de transporte. Recentemente, Ganapol [Ganapol, 1992] publicou uma biblioteca de *benchmarks* analíticos que inclui também problemas dependentes do tempo. Em um de seus trabalhos, Dulla et al. [Dulla et al., 2007] ilustrou a filosofia dos *benchmarks* analíticos com aplicações em sistemas subcríticos acionados por fonte externa. Uma solução analítica para meios homogêneos utilizando expansão do fluxo e da concentração em termos de autofunções foi obtida por Oliveira et al. [Oliveira et al., 2007]. Já Corno et al. [Corno et al., 2008], apresentou um procedimento analítico para a solução através da transformada de Laplace e a identificação de autovalores e autofunções espaciais.

Neste trabalho é proposta uma solução analítica para as equações de cinética em uma dimensão espacial considerando geometria cartesiana através da aplicação da Técnica da Transformada Integral Generalizada, conhecida como GITT (da sigla em inglês para *Generalized Integral Transform Tecnique*), combinada com a transformada de Laplace para a solução do sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) resultante. A transformada de Laplace tem sido empregada com sucesso na solução analítica de sistemas de EDO's, principalmente na área da Teoria de Transporte com o método $\mathcal{L}TS_N$ [Barichello e Vilhena, 1993] [Segatto e Vilhena, 1999].

A técnica da GITT é uma metodologia bem estabelecida para resolver analiticamente equações diferenciais lineares para uma ampla classe de problemas na área de física e engenharia. Por analítico queremos dizer que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução. A ideia principal dessa abordagem consiste na construção de um par de transformações a partir dos termos adjuntos do laplaciano que aparecem na equação diferencial a ser resolvida. Esse fato nos permite escrever a solução como uma expansão em série em termos de autofunções ortogonais, obtidas da solução de um problema de Sturm-Liouville auxiliar, construído a partir dos termos adjuntos. A ortogonalidade das autofunções completa o par de transformações. Existe uma vasta literatura sobre este método, para esclarecimento mencionamos os livros de Cotta [Cotta, 1998] [Cotta, 1993] [Cotta e Mikhaylov, 1997].

Inicialmente, especializamos a aplicação, sem perda da generalidade, às equações de cinética de nêutrons para um caso unidimensional, monoenergético e com um grupo de nêutrons atrasados. Tendo em vista que a equação para a concentração de nêutrons atrasados é uma equação diferencial linear de primeira ordem na variável temporal, a fim de tornar possível a aplicação da GITT a essa equação, introduzimos um termo de difusão fictícia multiplicado por um valor ε pequeno e positivo. Através deste procedimento, somos capazes

de resolver este conjunto de equações pelo método discutido. De fato, aplicando a técnica da GITT na equação da cinética modificada, obtemos uma equação diferencial matricial que tem solução bem conhecida quando ε tende a zero. Realizamos o mesmo procedimento para o cálculo considerando dois grupos de energia e 6 grupos de precursores de nêutrons atrasados. Para completar nosso estudo, realizamos simulações numéricas bem como análise dos resultados obtidos, com a precisão controlada pela ordem de truncamento da série.

A principal característica desta solução consiste na sua aptidão para lidar com problemas de cinética com matrizes de alta ordem (até 1500), já que os autovalores são distintos. Este fato nos dá certeza para afirmar que esta metodologia é uma técnica robusta para trabalhar com as equações da cinética unidimensionais, e de forma simples para problemas físicos mais realistas, o que significa para aqueles que consideram vários grupos da energia (até 200), bem como os problemas multidimensionais e com meios heterogêneos.

Recentemente, essa combinação da GITT com a transformada de Laplace tem sido aplicada com sucesso, obtendo resultados satisfatórios para um sistema de equações diferenciais parciais linares e não-lineares difusivo-advectivas [Wortmann, 2003].

A presente dissertação encontra-se estruturada da seguinte maneira: no capítulo 2, apresentamos os modelos físico-matemáticos que são base para nosso estudo. No capítulo 3, a metodologia utilizada para a solução do problema proposto é apresentada para um caso genérico. No capítulo 4, apresentamos a aplicação da metodologia para problemas de cinética de difusão de nêutrons, monoenergéticos e considerando multigrupos de energia, juntamente com os resultados obtidos. Por fim, no capítulo 6 encontram-se a conclusão e as sugestões para trabalhos futuros.

2. FORMULAÇÃO DA CINÉTICA DE REATORES - MODELOS FÍSICOS

Neste capítulo é feita uma descrição dos modelos físicos que são utilizados no estudo da cinética de reatores nucleares. Inicialmente é apresentada uma breve descrição da teoria de transporte, que é a base para a descrição da população de nêutrons em sistemas nucleares, também conhecida como física dos reatores. Após isso, maior atenção é dada na introdução da chamada Lei de Fick, que correlaciona a corrente de nêutrons com um gradiente de fluxo, o que reduz a equação de transporte a um modelo simplificado denominado teoria da difusão.

2.1 Modelo do transporte de partículas

O problema central da teoria de reatores nucleares é a determinação da distribuição de nêutrons no reator. Pelo estudo do comportamento temporal da população de nêutrons somos capazes de inferir sobre a estabilidade da reação de fissão em cadeia. Para determinar a distribuição de nêutrons no reator devemos investigar o processo de transporte de nêutrons.

A equação de transporte de partículas utilizada para estudar o transporte de nêutrons e fótons é uma versão linearizada da equação de Boltzmann desenvolvida para estudar a teoria cinética dos gases [Duderstadt e Hamilton, 1976]. A descrição da distribuição de nêutrons e fótons é feita considerando-os como partículas neutras e pontuais de massa constante e com velocidade e posição espacial bem definidas. As propriedades físicas que são inerentes às partículas, como o spin, os momentos magnéticos, bem como os efeitos quânticos, são incluídos implicitamente num parâmetro chamado seção de choque.

Os nêutrons viajam em linha reta entre colisões com os núcleos do material. Por não possuírem carga elétrica e serem bárions, as interações são causadas por forças de curto alcance (forças nucleares) entre o nêutron e o núcleo. A força gravitacional, por ser muito fraca, pode ser desprezada, e campos magnéticos não homogêneos, os quais acoplados com o momento magnético do nêutron, são praticamente inexistentes. Somente campos magnéticos muito intensos poderiam influenciar a trajetória dos nêutrons.

A população de nêutrons é suficientemente grande para que flutuações estatísticas

possam ser desprezadas, e pequeno para que as colisões entre partículas da mesma espécie sejam também desprezadas. O fluxo de nêutrons em reatores e aceleradores é baixo em comparação com a densidade do meio (mesmo para meios gasosos), por isso as colisões serão somente entre nêutrons e os núcleos do material que compõe o meio no qual viajam e as colisões nêutron-nêutron não são consideradas.

As colisões podem ser consideradas instantâneas, ou seja, o tempo de duração da colisão é considerado nulo. Esta é uma boa aproximação pois os núcleos compostos numa reação com nêutrons têm tempo de vida menor que 10^{-14} segundos. Considera-se que os nêutrons não alteram apreciavelmente o meio com o qual interagem, dentro dos intervalos de tempo considerados, e as propriedades dos materiais são consideradas isotrópicas, assim como as propriedades do núcleo e as composições dos materiais são consideradas conhecidas e estacionárias.

A descrição matemática da distribuição de nêutrons em um determinado meio material é baseada na equação de balanço chamada equação de transporte de nêutrons, que representa o balanço entre produção e perda de partículas num elemento do espaço de fase $(d\mathbf{r}, d\hat{\Omega}, dE)$ e é dada por:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial\varphi}{\partial t} + \hat{\Omega}\cdot\nabla\varphi + \Sigma_t(\mathbf{r}, E)\varphi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty \Sigma_s(E' \to E, \hat{\Omega}' \to \hat{\Omega})\varphi(\mathbf{r}, E', \hat{\Omega}', t)dE' + \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty \nu(E')\Sigma_f(E')\varphi(\mathbf{r}, E', \hat{\Omega}', t)dE' + S(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t),$$
(2.1)

em que,

E representa a energia dos nêutrons,

- ${\bf r}$ é o vetor posição espacial,
- t é a variável temporal,
- v é a velocidade dos nêutrons,
- Σ_t é a seção de choque macroscópica total,
- Σ_s é a seção de choque macroscópica de espalhamento,
- Σ_f é a seção de choque macroscópica de fissão,
- χ é o espectro de fissão,

 ν é o número médio de nêutrons emitidos na fissão,

 φ representa o fluxo angular de nêutrons,

 $\hat{\Omega}$ é o vetor unitário da direção das partículas,

 ∇ é o gradiente,

S é a fonte externa de nêutrons.

Na equação (2.1), os termos a esquerda da igualdade representam respectivamente as fugas do elemento de volume considerado bem como as perdas por colisão, enquanto que nos termos a direita estão representados os ganhos pelo espalhamento de nêutrons com energia E' e direção $\hat{\Omega}'$ para a energia E e direção $\hat{\Omega}$, por fissão e pela fonte externa, que é a fonte que não depende das colisões de nêutrons no sistema.

Contudo, a solução da equação (2.1) é muito complicada, principalmente devido à forte dependência das seções de choque com a energia (como exemplo, pode-se observar a dependência da seção de choque de fissão do Urânio-235 com a energia na figura (2.1)), e soluções exatas são encontradas apenas para modelos simplificados, por isso utiliza-se uma aproximação da equação de transporte conhecida como equação de difusão.



Figura 2.1: Seção de choque de fissão para o Urânio-235 (fonte: Agência Internacional de Energia Atômica).

2.2 Modelo da difusão de nêutrons

A maioria dos estudos em teoria de reatores tratam o movimento dos nêutrons como um processo de difusão, que assume que os nêutrons tendem a se difundir de regiões de alta densidade para regiões de baixa densidade. O tratamento do transporte de nêutrons como um processo difusivo tem validade limitada, porém essa aproximação é considerada adequada para muitas aplicações em reatores.

Podemos reescrever a equação de transporte de nêutrons em função do fluxo escalar integrando a equação (2.1) sobre todas as direções. Porém, a integral,

$$\int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi \ d\hat{\Omega},\tag{2.2}$$

não pode ser avaliada em função do fluxo. Então definimos a integral (2.2) em função da corrente de nêutrons $\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$:

$$\int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi \, d\hat{\Omega} = \nabla \cdot \int_{4\pi} \hat{\Omega} \varphi \, d\hat{\Omega} = \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t).$$
(2.3)

Assim, a equação (2.1) integrada em $\hat{\Omega}$ fica:

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

onde $\phi(\mathbf{r}, E, t)$ representa o fluxo escalar de nêutrons.

Podemos observar que na equação (2.4) temos duas incógnitas, fluxo ($\phi(\mathbf{r}, E, t)$) e corrente ($\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$). Então, se faz necessário uma relação que permita escrever a corrente de nêutrons, que é uma grandeza vetorial, em função do fluxo escalar de nêutrons, para que a equação fique em termos de apenas uma incógnita. Para isso, utiliza-se a *Lei de Fick*, a qual foi originalmente usada na química, onde mostrava que se a concentração de um soluto é maior em uma região da solução do que em outra, o soluto se difunde da região de maior concentração para a região de menor concentração. Além disso, também afirmava que a taxa de fluxo do soluto é proporcional ao negativo do gradiente da concentração do soluto. Esta é a afirmação original dessa lei.

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

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(\mathbf{r}, E)\nabla\phi(\mathbf{r}, E, t)$$
(2.5)

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

$$D(\mathbf{r}, E) = \frac{\lambda_{tr}(\mathbf{r}, E)}{3},\tag{2.6}$$

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

$$\lambda_{tr}(\mathbf{r}, E) = \frac{1}{\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E)} = \frac{1}{\Sigma_s(\mathbf{r}, E)(1 - \bar{\mu})}.$$
(2.7)

Na equação (2.7), Σ_{tr} é chamada de seção de choque macroscópica de transporte, Σ_s é a seção de choque macroscópica de espalhamento do meio e $\bar{\mu}$ é o valor aproximado do cosseno do ângulo no qual os nêutrons são espalhados no meio. O valor de $\bar{\mu}$ para a maioria dos nêutrons com energias de interesse nos cálculos pode ser computado pela fórmula:

$$\bar{\mu} = \frac{2}{3A},\tag{2.8}$$

onde A é o número de massa atômica do meio.

É importante enfatizar que a Lei de Fick não é uma relação exata e tem validade limitada nos seguintes casos:

• quando o meio é fortemente absorvedor de nêutrons;

2 Formulação da Cinética de Reatores - Modelos Físicos

- em regiões próximas à fonte ou às fronteiras do meio;
- quando o espalhamento de nêutrons é fortemente anisotrópico.

Então, substituindo a relação (2.5) na equação (2.4), e utilizando a aproximação de multigrupos de energia [Duderstadt e Hamilton, 1976] (que discretiza a variável contínua energia em G intervalos ou grupos), obtemos a equação de difusão de nêutrons para multigrupos de energia:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ag}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{sg}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{\substack{g'=1\\g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \chi_g \sum_{\substack{g'=1\\g' \neq g}}^G \nu'_g \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + S_g(\mathbf{r}, t).$$
(2.9)

Do lado direito da equação estão os termos que representam as fugas, as perdas por absorção, perdas por espalhamento, espalhamento para o grupo g, produção por fissão e fonte externa, respectivamente.

Para o caso mono-energético, temos:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r},t) = \nabla \cdot D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r},t) - \Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r},t) + \nu\Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r},t), \qquad (2.10)$$

onde Σ_a é a seção de choque macroscópica de absorção. Em ambas as formas, assumese que todos os nêutrons aparecem instantaneamente quando ocorre a fissão. O termo $\nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t)$ na equação (2.10) tem dimensão de nêutrons por cm^3 por segundo e representa a taxa de produção de nêutrons. Mas, na realidade, uma fração dos nêutrons não são produzidos diretamente na fissão, mas no decaimento subsequente dos produtos da fissão. Os nêutrons produzidos na fissão são chamados de nêutrons prontos e os nêutrons originários do decaimento são chamados de nêutrons atrasados.

2.3 Modelo da difusão considerando os nêutrons atrasados

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

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

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

Grupo	Meia-vida [s]	Constante de decaimento $\lambda_i [s^{-1}]$	Fração β_i
1	55,72	0,0124	0,000215
2	22,72	0,0305	0,001424
3	6.22	0,111	0,001274
4	2,30	0,301	0,002568
5	0,61	1,14	0,000748
6	0,23	3,01	0,000273

Tabela 2.1: Constantes referentes ao Urânio-235.

Sendo β a fração total de nêutrons atrasados dada por:

$$\beta = \sum_{i=1}^{6} \beta_i, \qquad (2.11)$$

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

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

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

Os nêutrons produzidos pelo grupo i podem ser contabilizados da seguinte forma, multiplicando a taxa de produção de nêutrons na fissão pela fração de nêutrons atrasados:

$$\beta_i \nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t). \tag{2.12}$$

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

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

$$\frac{\partial}{\partial t}C_i(\mathbf{r},t) = -\lambda_i C_i(\mathbf{r},t) + \beta_i \nu \Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r},t) \qquad i = 1,...,6.$$
(2.13)

Logo, incluindo os nêutrons atrasados na equação (2.10) através do fator β e da taxa de decaimento, temos:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r},t) = \nabla \cdot D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r},t) - \Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r},t) + (1-\beta)\nu\Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r},t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r},t),$$

$$\frac{\partial}{\partial t}C_i(\mathbf{r},t) = -\lambda_i C_i(\mathbf{r},t) + \beta_i \nu\Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r},t) \qquad i = 1,...,6.$$
(2.14)

2 Formulação da Cinética de Reatores - Modelos Físicos

Esse sistema de equações descreve o fluxo de nêutrons em um reator incluindo os nêutrons atrasados e sua solução, bem como do modelo multigrupo, é o objetivo deste trabalho.

3. OS MÉTODOS UTILIZADOS: TRANSFORMADAS INTEGRAIS

Nesse capítulo são apresentados os métodos de solução utilizados nesse trabalho. Primeiramente é mostrado o método da GITT, e em seguida são apresentadas as técnicas básicas da transformada de Laplace, utilizada na solução do problema transformado.

3.1 A Técnica da Transformada Integral Generalizada: GITT

Para solucionar um problema utilizando o método GITT (*Generalized Integral Trans*form Technique) algumas condições devem ser satisfeitas. O operador diferencial da equação a ser solucionada deve conter um termo laplaciano, porém a ausência desse termo pode ser resolvida adicionando-se o mesmo multiplicado por uma constante na qual o seu limite tenda a zero. Além disso, a dimensão na qual se aplica o método deve ser finita e as condições iniciais ou de contorno devem ser homogêneas, caso contrário pode-se fazer o uso de filtros matemáticos [Cassol, 2006].

A seguir serão mostrados os principais passos para a obtenção da solução de uma equação unidimensional em geometria cartesiana utilizando a GITT, seguindo metodologia de Wortmann [Wortmann, 2003].

Considere a seguinte equação:

$$A\nu(x,t) = 0, (3.1)$$

onde $a < x < b \in t > 0$ e sujeita às seguintes condições de contorno homogêneas:

$$\alpha_1 \frac{d\nu(a,t)}{dx} + \alpha_2 \nu(a,t) = 0, \qquad (3.2a)$$

$$\beta_1 \frac{d\nu(b,t)}{dx} + \beta_2 \nu(b,t) = 0, \qquad (3.2b)$$

onde A é o operador diferencial parcial associado ao problema, as constantes α_1 , α_2 , β_1 , β_2 são dependentes das propriedades físicas do problema. Primeiramente, deve-se expandir a função $\nu(x,t)$ em uma base adequada. Para isso escreve-se a equação (3.1) como:

$$A\nu(x,t) = B\nu(x,t) + L\nu(x,t),$$
(3.3)

onde L é um operador auto adjunto associado ao problema de Sturm-Liouville auxiliar e B é um operador associado aos termos restantes. Assim, L tem a forma geral:

$$L\Psi(\lambda, x) \equiv \nabla [p(x)\nabla\Psi(\lambda, x)] + q(x)\Psi(\lambda, x).$$
(3.4)

As funções p(x) e q(x) devem ser reais e contínuas, além de p(x) > 0 em todo intervalo (a, b), não podendo ser nula pois o termo laplaciano é condição necessária para a definição do problema auxiliar.

Então, depois de determinado o operador L, o problema de Sturm-Liouville auxiliar é definido da seguinte forma:

$$L\Psi(\lambda, x) + \lambda^2 \Psi(\lambda, x) = 0 \quad em \quad a < x < b,$$
(3.5)

com as condições de contorno dadas por

$$\alpha_1 \frac{d\Psi(\lambda, a)}{dx} + \alpha_2 \Psi(\lambda, a) = 0, \qquad (3.6a)$$

$$\beta_1 \frac{d\Psi(\lambda, b)}{dx} + \beta_2 \Psi(\lambda, b) = 0, \qquad (3.6b)$$

As constantes α_1 , α_2 , β_1 e β_2 devem ser as mesmas do problema original (3.1). O parâmetro λ é independente dessas constantes, logo a equação (3.5) pode ser escrita para um λ_m qualquer da seguinte forma:

$$L\Psi_m(x) + \lambda_m^2 \Psi_m(x) = 0, \qquad (3.7)$$

tal que $\Psi_m(x) \equiv \Psi(\lambda_m, x)$. $\Psi_m(x)$ e λ_m representam respectivamente as autofunções e os autovalores do operador L e formam uma base para o espaço onde o operador L está contido,

3 Os Métodos Utilizados: Transformadas Integrais

cuja ortogonalidade é definida da seguinte forma [Özisik, 1974]:

$$\frac{1}{\sqrt{N_m}\sqrt{N_n}} \int_a^b \Psi_m(x)\Psi_n(x)dx = \begin{cases} 0 & m \neq n, \\ 1 & m = n, \end{cases}$$
(3.8)

onde a norma N_m é dada por

$$N_m = \int_a^b \Psi_m^2(x) dx. \tag{3.9}$$

Esta base de autofunções será usada para expandir a variável $\nu(x,t)$ da equação (3.1) da seguinte forma

$$\nu(x,t) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\overline{\nu_m(t)}\Psi_m(x)}{\sqrt{N_m}},\tag{3.10}$$

essa expansão é conhecida na literatura como fórmula inversa da GITT.

Tendo resolvido o problema auxiliar e feito a expansão da variável independente, resta aplicar na equação (3.1) o seguinte operador integral

$$\frac{1}{\sqrt{N_n}} \int_a^b \Psi_n(x) dx. \tag{3.11}$$

Depois de realizadas todas as integrações obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) cuja variável dependente é $\overline{\nu_m(t)}$. A solução deste sistema nos dá $\overline{\nu_m(t)}$ e a solução do problema de autovalores associado nos dá como resultado as autofunções $\Psi_m(x)$. Dessa maneira, substituindo essas grandezas na fórmula inversa da GITT, dada pela fórmula (3.10), obtemos a função original pelo truncamento do somatório.

3.2 Solução do sistema de EDO's transformado

Nas aplicações típicas da GITT a solução do sistema de EDO's resultante geralmente é obtida utilizando métodos numéricos. Wortmann [Wortmann, 2003] propôs uma solução analítica utilizando a Transformada de Laplace juntamente com a diagonalização, técnica largamente utilizada para problemas em teoria de transporte através do método $\mathcal{L}TS_N$ e suas variações [Barichello e Vilhena, 1993] [Segatto e Vilhena, 1999]. Este procedimento será utilizado também no presente trabalho.

Considere a seguinte equação matricial:

$$\mathbf{F} \mathbf{Y}'(\mathbf{t}) + \mathbf{G} \mathbf{Y}(\mathbf{t}) = 0 \qquad 0 < t < \infty, \tag{3.12}$$

onde $\mathbf{F} \in \mathbf{G}$ são matrizes de elementos constantes e $\mathbf{Y}(\mathbf{t})$ é um vetor de incógnitas, sujeita à condição inicial

$$\mathbf{Y}(\mathbf{0}) = \mathbf{f}.\tag{3.13}$$

Considerando $\mathbf{H} = \mathbf{F}^{-1}\mathbf{G}$, temos

$$\mathbf{Y}'(\mathbf{t}) + \mathbf{H} \, \mathbf{Y}(\mathbf{t}) = 0 \qquad 0 < t < \infty.$$
(3.14)

Aplicando a Transformada de Laplace na equação (3.14), obtém-se

$$s \overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} - \mathbf{Y}(\mathbf{0}) + \mathbf{H} \overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} = 0,$$
 (3.15)

onde $\overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} = \mathcal{L}{\mathbf{Y}(\mathbf{t}), t \to s}.$

A equação (3.15) pode ser escrita como

$$s \overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} + \mathbf{H} \overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} = \mathbf{Y}(\mathbf{0}),$$
 (3.16)

ou

$$(s\mathbf{I} + \mathbf{H})\mathbf{Y}(\mathbf{s}) = \mathbf{Y}(\mathbf{0}), \qquad (3.17)$$

onde ${\bf I}$ é a matriz identidade.

O próximo passo consiste em decompor a matriz \mathbf{H} nos seus autovetores e autovalores, da seguinte forma

3 Os Métodos Utilizados: Transformadas Integrais

$$\mathbf{H} = \mathbf{X} \mathbf{D}_{\mathbf{g}} \mathbf{X}^{-1}, \tag{3.18}$$

onde **X** é a matriz dos autovetores da matriz **H**, \mathbf{X}^{-1} é a sua inversa e $\mathbf{D}_{\mathbf{g}}$ é a matriz diagonal dos autovalores de **H**. Este procedimento é válido quando os autovalores da matriz **H** forem distintos e não nulos.

Então, substituindo a equação (3.18) na (3.17), obtemos

$$(s\mathbf{I} + \mathbf{X}\mathbf{D}_{\mathbf{g}}\mathbf{X}^{-1})\overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} = \mathbf{Y}(\mathbf{0}), \qquad (3.19)$$

como $\mathbf{I} = \mathbf{X} \mathbf{X}^{-1}$, pode-se escrever

$$(s \mathbf{X} \mathbf{X}^{-1} + \mathbf{X} \mathbf{D}_{\mathbf{g}} \mathbf{X}^{-1}) \overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} = \mathbf{Y}(\mathbf{0}), \qquad (3.20)$$

e então

$$\mathbf{X}(s\,\mathbf{I} + \mathbf{D}_{\mathbf{g}})\mathbf{X}^{-1}\,\overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} = \mathbf{Y}(\mathbf{0}). \tag{3.21}$$

Multiplicando os dois lados da equação (3.21) por \mathbf{X}^{-1} , $(s \mathbf{I} + \mathbf{D}_{\mathbf{g}})^{-1}$ e por \mathbf{X} consecutivamente, podemos isolar $\overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})}$:

$$\overline{\mathbf{Y}(\mathbf{s})} = \mathbf{X}(s \mathbf{I} + \mathbf{D}_{\mathbf{g}})^{-1} \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}(\mathbf{0}).$$
(3.22)

Após isso aplica-se a transformada inversa de Laplace:

$$\mathcal{L}^{-1}\{\mathbf{Y}(\mathbf{s})\} = \mathcal{L}^{-1}\{\mathbf{X}\left(s\,\mathbf{I} + \mathbf{D}_{\mathbf{g}}\right)^{-1}\mathbf{X}^{-1}\,\mathbf{Y}(\mathbf{0})\},\tag{3.23}$$

sendo $\mathbf{X} \in \mathbf{Y}(\mathbf{0})$ constantes, podemos escrever

$$\mathbf{Y}(\mathbf{t}) = \mathbf{X} \, \mathcal{L}^{-1}\{(s \, \mathbf{I} + \mathbf{D}_{\mathbf{g}})^{-1}\} \, \mathbf{X}^{-1} \, \mathbf{Y}(\mathbf{0}). \tag{3.24}$$

3 Os Métodos Utilizados: Transformadas Integrais

Então escreve-se a equação (3.24) da seguinte forma:

$$\mathbf{Y}(\mathbf{t}) = \mathbf{X} \mathbf{E}(\mathbf{t}) \mathbf{X}^{-1} \mathbf{Y}(\mathbf{0}), \qquad (3.25)$$

sendo $\mathbf{E}(\mathbf{t}) = \mathcal{L}^{-1}\{(s \mathbf{I} + \mathbf{D}_{\mathbf{g}})^{-1}\}.$

A matriz $(s \mathbf{I} + \mathbf{D}_{\mathbf{g}})$ é uma matriz diagonal, cujos elementos da diagonal são dados por $(s + d_i)$, onde d_i são os autovalores da matriz **H**. Da álgebra matricial sabe-se que a inversa de uma matriz diagonal é dada pela inversa de cada elemento da diagonal, então:

$$\mathbf{E}(\mathbf{t}) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \dots & 0\\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \dots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & 0\\ 0 & 0 & \dots & \frac{1}{s+d_n} \end{pmatrix} \right\}.$$
 (3.26)

Essa transformada de Laplace inversa é tabelada e é dada por

$$\mathbf{E}(\mathbf{t}) = \begin{pmatrix} e^{-d_1 t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 t} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & e^{-d_n t} \end{pmatrix}.$$
 (3.27)

Assim, a solução do sistema de EDO's, dada pela equação (3.25), está completamente determinada.

4. APLICAÇÃO DA METODOLOGIA PROPOSTA

Neste capítulo, a metodologia proposta neste trabalho e descrita de forma genérica no capítulo 3, será aplicada em problemas de cinética considerando um caso monoenergético com 1 grupo de precursores de nêutrons atrasados e em um caso com 2 grupos de energia considerando 6 grupos de precursores de nêutrons atrasados. Serão também apresentados os resultados obtidos para ambos os casos.

4.1 Caso 1: monoenergético com 1 grupo de nêutrons atrasados

Vamos considerar, sem perda da generalidade, as equações de cinética unidimensionais em geometria cartesiana assumindo nêutrons monoenergéticos e um grupo de precursores de nêutrons atrasados:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x,t) + \left[-\Sigma_a + (1-\beta)\nu\Sigma_f\right]\phi(x,t) + \lambda C(x,t), \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}C(x,t) = -\lambda C(x,t) + \beta\nu\Sigma_f\phi(x,t),$$

para $t > 0 \in 0 < x < L$, sujeitas às condições de contorno do tipo vácuo ($\phi(0, t) = \phi(L, t) = 0$) e às condições iniciais:

$$\phi(x,0) = \phi_0(x), \qquad (4.2)$$

$$C(x,0) = \frac{\beta \nu \Sigma_f}{\lambda} \phi_0(x).$$

Aqui, $\phi(x,t) \ [cm^{-2}s^{-1}]$ denota o fluxo de nêutrons, $\phi_0(x)$ é o fluxo de nêutrons no tempo inicial (t = 0), $C(x,t) \ [cm^{-2}s^{-1}]$ é a concentração dos precursores de nêutrons atrasados e $v \ [cm/s]$ é a velocidade dos nêutrons, $D \ [cm]$ é o coeficiente de difusão, $\Sigma_a \ [cm^{-1}]$ é a seção de choque macroscópica de absorção, $(1 - \beta)$ é a fração de nêutrons prontos, ν é o número médio de nêutrons emitidos na fissão, $\Sigma_f \ [cm^{-1}]$ é a seção de choque macroscópica de fissão e λ $[s^{-1}]$ é a constante de decaimento.

Com o objetivo de resolver o problema (4.1) pelo método espectral, conhecido como GITT [Cotta, 1998] [Cotta, 1993], introduzimos um termo de difusão fictícia na equação para a concentração de precursores:

$$\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(x,t),$$
 (4.3)

onde ε é um parâmetro de valor pequeno e positivo. Nesse caso, assume-se também condições de contorno homogêneas, ou seja, C(0,t) = C(L,t) = 0.

Portanto, podemos reescrever o sistema (4.1) como:

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\phi(x,t) = D\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi(x,t) + \left[-\Sigma_a + (1-\beta)\nu\Sigma_f\right]\phi(x,t) + \lambda C(x,t), \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}C(x,t) = \varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2}C(x,t) - \lambda C(x,t) + \beta\nu\Sigma_f\phi(x,t).$$

A existência do termo laplaciano na equação a ser resolvida é uma exigência para aplicação do método da GITT, pois possibilita a determinação do problema de Sturm-Liouville auxiliar. Logo, o pressuposto anterior (equação (4.3)) nos permite aplicar o método da GITT para resolver o sistema de equações (4.4).

O problema auxiliar é definido como:

$$\chi_n''(x) + \gamma_n^2 \chi_n(x) = 0 \qquad em \qquad 0 < x < L,$$
(4.5)

com as condições de contorno

$$\chi_n(0) = \chi_n(L) = 0, \tag{4.6}$$

cuja solução é $\chi_n(x) = \sin(\gamma_n x)$, com os autovalores $\gamma_n = n\pi/L$, para n = 1, 2, 3, ...

Sendo assim, expandimos o fluxo de nêutrons e a concentração de precursores nas seguintes séries:

$$\phi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(t) \sin(\gamma_n x), \qquad (4.7)$$

$$C(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n(t) \sin(\gamma_n x), \qquad (4.8)$$

Então, substituindo (4.7) e (4.8) no sistema de equações (4.4), e lembrando da equação (4.5) em que $\chi''_n(x) = -\gamma_n^2 \chi_n(x)$, temos

$$\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dt}\varphi_n(t)\sin(\gamma_n x) = -vD\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}(\gamma_n^2)\varphi_n(t)\sin(\gamma_n x) + v[-\Sigma_a + (1-\beta)\nu\Sigma_f]\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_n(t)\sin(\gamma_n x) + v\lambda\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\xi_n(t)\sin(\gamma_n x),$$
(4.9)

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dt} \xi_n(t) \sin(\gamma_n x) = - \varepsilon \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} (\gamma_n^2) \xi_n(t) \sin(\gamma_n x) - \lambda \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n(t) \sin(\gamma_n x) + \beta \nu \Sigma_f \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(t) \sin(\gamma_n x).$$
(4.10)

Dando sequência aos passos descritos no capítulo 3, aplica-se o operador integral

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin(\gamma_m x) dx, \qquad (4.11)$$

nas equações (4.9) e (4.10) e após reagrupar os termos, temos:

$$\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{d}{dt}\varphi_n(t)\int_0^L\sin(\gamma_m x)\sin(\gamma_n x)dx =$$
$$+\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty}v[-D\gamma_n^2 - \Sigma_a + (1-\beta)\nu\Sigma_f]\varphi_n(t)\int_0^L\sin(\gamma_m x)\sin(\gamma_n x)dx$$
$$+v\lambda\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty}\xi_n(t)\int_0^L\sin(\gamma_m x)\sin(\gamma_n x)dx,\qquad(4.12)$$

$$\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dt} \xi_n(t) \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx =$$

$$\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} (-\varepsilon \gamma_n^2 - \lambda) \xi_n(t) \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx$$

$$+ \beta \nu \Sigma_f \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(t) \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx.$$
(4.13)

Tomando:

$$\mathbf{A} = \{a_{m,n}\}, \text{ onde } a_{m,n} = v[D\gamma_n^2 + \Sigma_a - (1 - \beta)\nu\Sigma_f] \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx,$$

$$\mathbf{B} = \{b_{m,n}\}, \text{ onde } b_{m,n} = -v\lambda \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx,$$

$$\mathbf{C} = \{c_{m,n}\}, \text{ onde } c_{m,n} = -\beta\nu\Sigma_f \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx,$$

$$\mathbf{D} = \{d_{m,n}\}, \text{ onde } d_{m,n} = (\varepsilon\gamma_n^2 + \lambda) \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx.$$

Então, temos como resultado a seguinte equação matricial para os coeficientes da expansão da solução:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \varphi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}) \\ \xi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{C} & \mathbf{D} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}) \\ \xi_{\mathbf{n}}(\mathbf{t}) \end{pmatrix}, \qquad (4.14)$$

para n = 1: N, onde N é a ordem de truncamento da série. Lembrando que devido à aplicação da propriedade da ortogonalidade das autofunções, **A**, **B**, **C** e **D** são matrizes diagonais.

Podemos notar que a equação (4.14) é uma equação matricial linear e homogênea de primeira ordem e pode ser escrita como

$$\mathbf{X}'(\mathbf{t}) + \mathbf{F} \, \mathbf{X}(\mathbf{t}) = 0, \tag{4.15}$$

essa equação tem a solução bem conhecida:

$$\mathbf{X}(\mathbf{t}) = \exp(-\mathbf{F}\,t)\,\mathbf{X}(\mathbf{0}),\tag{4.16}$$

cuja condição inicial $\mathbf{X}(\mathbf{0})$ é dada pelo vetor:

$$\left(\begin{array}{c}\varphi_{\mathbf{n}}(\mathbf{0})\\\xi_{\mathbf{n}}(\mathbf{0})\end{array}\right),\tag{4.17}$$

onde

$$\varphi_{\mathbf{n}}(\mathbf{0}) = \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \phi_0(x) \sin(\gamma_n, x) dx, \qquad (4.18)$$

е

$$\xi_{\mathbf{n}}(\mathbf{0}) = \frac{\beta \nu \Sigma_f}{\lambda} \varphi_{\mathbf{n}}(\mathbf{0}). \tag{4.19}$$

Além disso, para problemas matriciais nos quais os autovalores da matriz \mathbf{F} são distintos, a exponencial de matriz pode ser expressa como:

$$\exp(-\mathbf{F}t) = \mathbf{Y}\exp(-\mathbf{D}_{\mathbf{g}}t)\mathbf{Y}^{-1},$$
(4.20)

onde **Y** é a matriz dos autovetores da matriz **F**, \mathbf{Y}^{-1} é sua inversa e $\mathbf{D}_{\mathbf{g}}$ é a matriz diagonal dos autovalores da matriz **F**.

Devemos lembrar a existência na literatura de várias abordagens [Moler e Van Loan, 1978] para derivar a solução apresentada na equação (4.20). Por exemplo, mencionamos a técnica referente à aplicação da transformada de Laplace combinada com a decomposição da matriz. Esta metodologia tem a vantagem de ser geral, no sentido de que pode ser aplicada para resolver esta classe de problemas com autovalores repetidos. Para mais detalhes veja os trabalhos de Segatto et al. [Segatto et al., 1999] [Segatto et al., 2008]. Devemos observar que a solução do problema (4.1) é determinada pelas equações (4.7) e (4.8) cujos coeficientes da expansão da solução são determinados pela fórmula (4.16), quando ε tende a zero. Cabe salientar que essa solução é exata exceto pela ordem de truncamento da série.

4.1.1 Resultados

Em vista de verificar a capacidade da metodologia proposta para tratar da equação cinética de difusão de nêutrons, primeiramente resolvemos um problema considerando os parâmetros nucleares da tabela (4.1).

Tabela 4.1:	Parâmetros	nucleares -	caso	1	[Oliveira	et	al.,	2007]
					L		-)]

D [cm]	0,96343
v $[cm/s]$	$1,1035 \mathrm{x} 10^{7}$
$\Sigma_a \ [cm^{-1}]$	$1,5843 \mathrm{x} 10^{-2}$
$\nu \Sigma_f \ [cm^{-1}]$	$3,3303 \mathrm{x} 10^{-2}$
β	0,0045
$\lambda \ [s^{-1}]$	0,08

A geometria considerada foi do tipo placa plana para meio homogêneo com condições de contorno do tipo vácuo ($\phi(0) = \phi(L) = 0$), e L = 22, 9 cm, como indicado na figura (4.1).



Figura 4.1: Geometria do problema.

Como condição inicial, $\phi_0(x)$, utilizamos a solução da equação da difusão em estado estacionário obtida por Petersen [Petersen, 2008], cujo fluxo de nêutrons está representado na figura (4.2).

Inicialmente, realizamos os cálculos com o objetivo de verificar a convergência dos resultados para o fluxo de nêutrons ao fazermos ε tender a zero. Para isso, fizemos os valores de ε variarem de 10⁻³ a 10⁻⁹. Os resultados são mostrados na tabela (4.2). Verificando os



Figura 4.2: Solução da equação da difusão em estado estacionário.

resultados obtidos podemos facilmente constatar uma coincidência de 10 algarismos significativos entre os valores encontrados para $\varepsilon = 10^{-8}$ e $\varepsilon = 10^{-9}$. Com isso, podemos dizer que o problema resolvido considerando uma difusão fictícia converge para a solução exata.

Tabela 4.2: Convergência do fluxo de nêutrons com a diminuição do valor de ε .

ε	$\phi \ [cm^{-2}s^{-1}]$
10^{-3}	0,2086263018
10^{-4}	0,2086298352
10^{-5}	0,2086301885
10^{-6}	0,2086302239
10^{-7}	0,2086302274
10^{-8}	0,2086302278
10^{-9}	0,2086302278

O próximo passo é verificar a convergência da solução quando aumentamos o número de termos da série. Na tabela (4.3), mostramos os resultados obtidos para o fluxo de nêutrons obtidos aumentando o número de termos da solução em série até 200, considerando x = L/2, ou seja, o meio da placa. Por inspeção da tabela (4.3) podemos notar uma precisão de 10 algarismos significativos quando fazemos a soma de 100 termos na solução em série. Isso nos dá confiança para afirmar que os resultados apresentados na tabela (4.3) tem uma precisão de 10 algarismos significativos para $\varepsilon = 10^{-8}$, exceto pelo erro de arredondamento.

N	$\phi[cm^{-2}s^{-1}]$
2	0,2086302278
10	$0,\!2085619287$
20	0,2085618182
30	0,2085618279
40	$0,\!2085618251$
50	$0,\!2085618263$
60	$0,\!2085618257$
70	0,2085618260
80	$0,\!2085618258$
90	0,2085618260
100	0,2085618259
150	0,2085618259
200	0,2085618259

Tabela 4.3: Convergência do fluxo de nêutrons com o aumento do valor de N.

Uma vez mostrada a convergência do método fizemos um gráfico para o fluxo de nêutrons em função da variável espacial para tempos diferentes. Podemos observar no gráfico (4.3) que, conforme o tempo aumenta, os valores para o fluxo diminuem. Isso fica mais claro observando o gráfico 3-D (4.4), onde é fácil constatar o comportamento assintótico do fluxo quando o tempo tende ao infinito, ou seja, a medida que o tempo aumenta, o comportamento do fluxo tende à solução estacionária. Comportamento similar é observado para a concentração de precursores no gráfico (4.5).

Por fim, no gráfico (4.6) observamos o tempo computacional utilizado para os cálculos anteriores. Cabe mencionar que o tempo máximo utilizado foi de 15 minutos.

4.2 Caso 2: multigrupos de energia com 6 grupos de nêutrons atrasados

Nesse caso, estendemos a metodologia proposta nesse trabalho aplicando em problemas com 2 grupos de energia e 6 grupos de precursores de nêutrons atrasados.



Figura 4.3: Gráfico do fluxo de nêutrons para diferentes tempos.



Figura 4.4: Gráfico 3-D para o fluxo de nêutrons.



Figura 4.5: Gráfico 3-D para a concentração de precursores.



Figura 4.6: Tempo computacional.

No caso de aplicações com 2 grupos de energia, o grupo 1 é escolhido para caracterizar o grupo rápido e o grupo 2 o grupo térmico. O limite de energia para o grupo térmico é escolhido suficientemente alto para que o *upscattering*, ou seja, o espalhamento do grupo 2 para o grupo 1, possa ser ignorado. Esse limite de energia corresponde a 0, 5 - 1, 0 MeV em reatores moderados à água.

As equações de cinética para 2 grupos de energia e 6 grupos de precursores podem ser escritas como:

$$\frac{1}{v_1} \frac{\partial}{\partial t} \phi_1(x,t) = D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1(x,t) - \Sigma_{a1} \phi_1(x,t) + \Sigma_{s21} \phi_2(x,t) + (1-\beta) \chi_1^p [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2(x,t)] + \chi_1^d \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(x,t),$$
(4.21)

$$\frac{1}{v_2} \frac{\partial}{\partial t} \phi_2(x,t) = D_2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_2(x,t) - \Sigma_{a2} \phi_2(x,t) + \Sigma_{s12} \phi_1(x,t) + (1-\beta) \chi_2^p [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2(x,t)] + \chi_2^d \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(x,t),$$
(4.22)

$$\frac{\partial}{\partial t}C_i(x,t) = -\lambda_i C_i(x,t) + \beta_i [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2(x,t)] \qquad i = 1:6, \quad (4.23)$$

onde $\chi_1^p \in \chi_1^d$ são os espectros de fissão para o grupo rápido para os nêutrons prontos e atrasados, $\chi_2^p \in \chi_2^d$ são os espectros de fissão para o grupo térmico os nêutrons prontos e atrasados, Σ_a é a seção de choque de absorção do respectivo grupo, Σ_{s21} é a seção de choque de espalhamento do grupo 2 para o grupo 1 e Σ_{s12} é a seção de choque de espalhamento do grupo 2 para o grupo 1 e Σ_{s12} é a seção de choque de espalhamento do grupo 2.

Visto que essencialmente todos nêutrons de fissão são gerados no grupo rápido, podemos dizer que $\chi_1^p = \chi_1^d = 1$, $\chi_2^p = \chi_2^d = 0$, por isso, o termo de fissão só irá aparecer na equação para o grupo rápido. Como dito anteriormente, o espalhamento do grupo 2 para o grupo 1 pode ser ignorado, então $\Sigma_{s21} = 0$.

Logo, as equações (4.21) e (4.22) podem ser escritas como:

$$\frac{1}{v_1} \frac{\partial}{\partial t} \phi_1(x,t) = D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_1(x,t) - \Sigma_{a1} \phi_1(x,t)
+ (1-\beta) [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2(x,t)] + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(x,t), \quad (4.24)$$

$$\frac{1}{v_2}\frac{\partial}{\partial t}\phi_2(x,t) = D_2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi_2(x,t) - \Sigma_{a2}\phi_2(x,t) + \Sigma_{s12}\phi_1(x,t).$$
(4.25)

Em procedimento similar ao que foi realizado para o caso monoenergético, introduzimos um termo de difusão fictícia na equação para a concentração de precursores (4.23) e obtemos:

$$\frac{\partial}{\partial t}C_i(x,t) = \varepsilon \frac{\partial^2}{\partial x^2}C_i(x,t) - \lambda_i C_i(x,t) + \beta_i [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2(x,t)] \quad i = 1:6.(4.26)$$

Então, para resolver o conjunto de equações formado pelas equações (4.24), (4.25) e (4.26), expandimos o fluxo, para o grupo 1 e para o grupo 2, e as concentrações de acordo com as seguintes séries:

$$\phi_1(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{1n}(t) \chi_n(x), \qquad (4.27)$$

$$\phi_2(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{2n}(t) \chi_n(x), \qquad (4.28)$$

$$C_i(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_{ni}(t) \chi_n(x) \qquad i = 1:6,$$
(4.29)

onde $\chi_n(x) = sen(\gamma_n x)$ são as autofunções obtidas da solução do problema de Sturm-Liouville auxiliar, cujos autovalores são $\gamma_n = n\pi/L$, da mesma forma que para o caso monoenergético.

Substituindo (4.27), (4.28) e (4.29) nas equações (4.24), (4.25) e (4.26), isolando os termos e lembrando do problema de Sturm-Liouville (4.5), o qual diz que $\chi_n''(x) = -\gamma_n^2 \chi_n(x)$,

temos:

$$\frac{1}{v_1}\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{d}{dt}\varphi_{1n}(t)\chi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}(-D_1\gamma_n^2 - \Sigma_{a1} + (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1})\varphi_{1n}(t)\chi_n(x) + (1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2}\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_{2n}(t)\chi_n(x) + \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{i=1}^{6}\lambda_i\sum_{n=1}^{\infty}\xi_{ni}(t)\chi_n(x), \quad (4.30)$$

$$\frac{1}{v_2}\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{d}{dt}\varphi_{2n}(t)\chi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}(-D_2\gamma_n^2 - \Sigma_{a2})\varphi_{2n}(t)\chi_n(x) + \Sigma_{s12}\sqrt{\frac{2}{L}}\sum_{n=1}^{\infty}\varphi_{1n}(t)\chi_n(x), \qquad (4.31)$$

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dt} \xi_{ni}(t) \chi_n(x) = -\sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} (\varepsilon \gamma_n^2 + \lambda_i) \xi_{ni}(t) \chi_n(x) + \beta_i \nu_1 \Sigma_{f1} \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{1n}(t) \chi_n(x) + \beta_i \nu_2 \Sigma_{f2} \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{2n}(t) \chi_n(x) \qquad i = 1: (4.32)$$

Seguindo com o procedimento da GITT, aplicamos o operador integral

$$\sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin(\gamma_m x) dx, \tag{4.33}$$

nas equações (4.30), (4.31) e (4.32) e obtemos:

$$\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dt} \quad \varphi_{1n}(t) \quad \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x) \sin(\gamma_{n}x) dx = \\
+ \quad \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} v_{1}(-D_{1}\gamma_{n}^{2} - \Sigma_{a1} + (1-\beta)\nu_{1}\Sigma_{f1})\varphi_{1n}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x) \sin(\gamma_{n}x) dx \\
+ \quad v_{1}(1-\beta)\nu_{2}\Sigma_{f2}\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{2n}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x) \sin(\gamma_{n}x) dx \\
+ \quad \frac{2}{L}\sum_{i=1}^{6} v_{1}\lambda_{i}\sum_{n=1}^{\infty} \xi_{ni}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x) \sin(\gamma_{n}x) dx, \quad (4.34)$$

$$\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dt} \quad \varphi_{2n}(t) \quad \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x)\sin(\gamma_{n}x)(x)dx = \\
+ \quad \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} v_{2}(-D_{2}\gamma_{n}^{2} - \Sigma_{a2})\varphi_{2n}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x)\sin(\gamma_{n}x)dx \\
+ \quad v_{2}\Sigma_{s12}\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{1n}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x)\sin(\gamma_{n}x)dx, \quad (4.35)$$

$$\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{d}{dt} \quad \xi_{ni}(t) \quad \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x)\sin(\gamma_{n}x)dx = \\
- \quad \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} (\varepsilon\gamma_{n}^{2} + \lambda_{i})\xi_{ni}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x)\sin(\gamma_{n}x)dx \\
+ \quad \beta_{i}\nu_{1}\Sigma_{f1}\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{1n}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x)\sin(\gamma_{n}x)dx \\
+ \quad \beta_{i}\nu_{2}\Sigma_{f2}\frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} \varphi_{2n}(t) \int_{0}^{L} \sin(\gamma_{m}x)\sin(\gamma_{n}x)dx \qquad i = 1:6. \quad (4.36)$$

Tomando:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \{a_{m,n}\}, \text{ onde } a_{m,n} = v_1(D_1\gamma_n^2 + \Sigma_{a1} - (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1}) \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \\ \mathbf{B} &= \{b_{m,n}\}, \text{ onde } b_{m,n} = -v_1(1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2} \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \\ \mathbf{C_i} &= \{c_{m,n}^i\}, \text{ onde } c_{m,n}^i = -v_1\lambda_i \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \text{ para } i = 1:6, \\ \mathbf{D} &= \{d_{m,n}\}, \text{ onde } d_{m,n} = -v_2\Sigma_{s12} \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \\ \mathbf{E} &= \{e_{m,n}\}, \text{ onde } e_{m,n} = v_2(D_2\gamma_n^2 + \Sigma_{a2}) \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \\ \mathbf{F} &= \{f_{m,n}\}, \text{ onde } f_{m,n} = 0, \\ \mathbf{G_i} &= \{g_{m,n}^i\}, \text{ onde } g_{m,n}^i = -\beta_i\nu_1\Sigma_{f1} \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \text{ para } i = 1:6, \\ \mathbf{H_i} &= \{h_{m,n}^i\}, \text{ onde } h_{m,n}^i = -\beta_i\nu_2\Sigma_{f2} \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \text{ para } i = 1:6, \\ \mathbf{I_i} &= \{h_{m,n}^i\}, \text{ onde } h_{m,n}^i = (\varepsilon\gamma_n^2 + \lambda_i) \int_0^L \sin(\gamma_m x) \sin(\gamma_n x) dx, \text{ para } i = 1:6. \end{aligned}$$

Então, temos como resultado a seguinte equação matricial para os coeficientes da expansão da solução:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \varphi_{1n}(\mathbf{t}) \\ \varphi_{2n}(\mathbf{t}) \\ \xi_{n1}(\mathbf{t}) \\ \vdots \\ \xi_{n6}(\mathbf{t}) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} & \mathbf{C}_{1} & \dots & \mathbf{C}_{6} \\ \mathbf{D} & \mathbf{E} & \mathbf{F} & \dots & \mathbf{F} \\ \mathbf{G}_{1} & \mathbf{H}_{1} & \mathbf{I}_{1} & \dots & \mathbf{F} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{G}_{6} & \mathbf{H}_{6} & \mathbf{F} & \dots & \mathbf{I}_{6} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1n}(\mathbf{t}) \\ \varphi_{2n}(\mathbf{t}) \\ \xi_{n1}(\mathbf{t}) \\ \vdots \\ \xi_{n6}(\mathbf{t}) \end{pmatrix}, \quad (4.37)$$

para n = 1: N, onde N é a ordem de truncamento da série. Lembrando que devido à aplicação da propriedade da ortogonalidade das autofunções, A, B, C_i, D, E, G_i, H_i e I_i são matrizes diagonais, com exceção da matriz F, que é uma matriz de zeros de ordem N.

Assim como no caso monoenergético, a equação (4.37) pode ser escrita como:

$$\mathbf{X}'(\mathbf{t}) + \mathbf{J}\,\mathbf{X}(\mathbf{t}) = 0,\tag{4.38}$$

essa equação tem a solução bem conhecida:

$$\mathbf{X}(\mathbf{t}) = \exp(-\mathbf{J}\,t)\,\mathbf{X}(\mathbf{0}),\tag{4.39}$$

cuja condição inicial é dada por (4.18) e (4.19).

A solução (4.39) pode ser escrita como:

$$\mathbf{X}(\mathbf{t}) = \mathbf{Y} \exp(-\mathbf{D}_{\mathbf{g}} t) \mathbf{Y}^{-1} \mathbf{X}(\mathbf{0}), \qquad (4.40)$$

onde **Y** é a matriz dos autovetores de **J**, \mathbf{Y}^{-1} é a sua inversa e $\mathbf{D}_{\mathbf{g}}$ é a diagonal dos autovalores de **J**, lembrando que este procedimento só pode ser realizado se os autovalores de **J** forem distintos.

Por fim, a solução do sistema formado pelas equações (4.24), (4.25) e (4.26) é determinada pelas equações (4.27), (4.28) e (4.29) cujos coeficientes da expansão da solução são determinados pela fórmula (4.40), quando ε tende a zero.

4.2.1 Resultados

Para o caso considerando dois grupos de energia calculamos o fluxo de nêutrons tanto para o grupo rápido como para o térmico, bem como as concentrações dos seis grupos de precursores utilizando os parâmetros mostrados nas tabelas (4.4) e (4.5).

Parâmetro	Grupo 1	Grupo 2
D $[cm]$	1,0	$0,\!5$
v $[cm/s]$	$1,0x10^{7}$	$3,0x10^{5}$
$\Sigma_a \ [cm^{-1}]$	0,02	0,08
$\Sigma_{g \to g+1} \ [cm^{-1}]$	0.01	0
$\nu \Sigma_f \ [cm^{-1}]$	0,005	0,099

Tabela 4.4: Parâmetros nucleares - caso 2 [Nagaya e Kobayashi, 1995].

Tabela 4.5: Parâmetros referentes aos nêutrons atrasados [Nagaya e Kobayashi, 1995].

i	eta_i	$\lambda_i \ [s^{-1}]$
1	0,00025	0,0124
2	0,00164	0,0305
3	0,00147	0,111
4	0,00296	0,3010
5	0,00086	1,1400
6	0,00032	3,0100

A geometria considerada é a mesma do caso monoenergético, mostrada na figura (4.1), com L = 160 cm. Como condição inicial foi novamente utilizada a solução da difusão para o caso estacionário encontrada por Petersen [Petersen, 2008]. A condição inicial utilizada para o fluxo rápido está representada no gráfico (4.7) e para o grupo térmico no gráfico (4.8).

Inicialmente, nas tabelas (4.6) e (4.7) apresentamos a convergência para o fluxo rápido e para o térmico, respectivamente, diminuindo o valor de ε . Na tabela (4.6), podemos observar que para $\varepsilon = 10^{-6}$ temos uma coincidência de 12 dígitos, ou 9 algarismos



Figura 4.7: Solução da equação da difusão em estado estacionário para o grupo rápido.



Figura 4.8: Solução da equação da difusão em estado estacionário para o grupo térmico.

significativos, com o valor encontrado fazendo $\varepsilon = 10^{-7}$, fato que nos dá confiança para afirmar que a solução encontrada converge para a solução exata quando ε tende a zero. Observando a tabela (4.7), pode-se notar que para o fluxo térmico a solução converge com a mesma precisão anteriormente descrita para $\varepsilon = 10^{-5}$.

Tabela 4.6: Convergência do fluxo para o grupo de nêutrons rápidos com a diminuição do valor de ε .

ε	$\phi_1 \ [cm^{-2}s^{-1}]$
10^{-3}	0,000881554789
10^{-4}	0,000881555095
10^{-5}	0,000881555125
10^{-6}	0,000881555128
10^{-7}	0,000881555128

Tabela 4.7: Convergência do fluxo para o grupo de nêutrons térmicos com a diminuição do valor de ε .

ε	$\phi_2 \ [cm^{-2}s^{-1}]$
10^{-3}	0,000109930416
10^{-4}	0,000109930454
10^{-5}	0,000109930458
10^{-6}	0,000109930458
10^{-7}	0,000109930458

Na sequência analisamos a convergência da solução com o aumento do número de termos da solução em série. Com esta finalidade, calculamos os valores em x = L/2 e aumentamos N até 150. Dos resultados para o fluxo do grupo 1 mostrados na tabela (4.8), podemos observar que considerando a soma de 40 termos obtemos uma precisão de 11 dígitos, ou 8 algarismos significativos. Já para o fluxo calculado para o grupo 2, observamos na tabela (4.9), que para a soma de apenas 20 termos na série, obtemos a mesma precisão anteriormente descrita. Tabela 4.8: Convergência do fluxo de nêutrons para o grupo rápido com o aumento do valor de N.

N	$\phi_1 \ [cm^{-2}s^{-1}]$
2	0,00088155513
10	0,00088019437
20	0,00088019504
30	0,00088019498
40	0,00088019499
50	0,00088019499
100	0,00088019499
150	0,00088019499

Tabela 4.9: Convergência do fluxo de nêutrons para o grupo térmico com o aumento do valor de N.

N	$\phi_2 \ [cm^{-2}s^{-1}]$
2	0,00010993046
10	0,00010976388
20	0,00010976394
30	0,00010976394
40	0,00010976394
50	0,00010976394
100	0,00010976394
150	0,00010976394

Depois de mostrada a convergência dos resultados obtidos também para esse caso, a fim de visualizar o comportamento do fluxo como função do espaço e do tempo, ilustramos um um gráfico primeiramente o fluxo rápido, na figura (4.9), e o fluxo térmico, na figura (4.10), em função da variável espacial considerando valores diversos para a variável temporal. Em ambos os casos observamos a diminuição do fluxo com o aumento do tempo. Esse comportamento assintótico é melhor observado nos gráficos 3-D para o fluxo 1, figura (4.11), para o fluxo 2, figura (4.12), e para a concentração de um dos grupos de precursores, figura (4.13).



Figura 4.9: Gráfico do fluxo de nêutrons rápidos para diferentes tempos.

No gráfico (4.14) estão representados os tempos computacionais utilizados para a realização dos cálculos para cada valor diferente de N. Cabe destacar que o tempo máximo utilizado foi de 45 minutos.



Figura 4.10: Gráfico do fluxo de nêutrons térmicos para diferentes tempos.



Figura 4.11: Gráfico 3-D para o fluxo de nêutrons rápidos.



Figura 4.12: Gráfico 3-D para o fluxo de nêutrons térmicos.



Figura 4.13: Gráfico 3-D para a concentração de precursores.



Figura 4.14: Tempo computacional.

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho, apresentamos uma solução analítica para a equação cinética de difusão de nêutrons unidimensional em geometria cartesiana, considerando os modelos monoenergético e multigrupo de energia, bem como seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. A solução discutida é analítica, no sentido de que nenhuma aproximação é feita ao longo da derivação da solução. Tendo em vista que o problema resolvido de cinética satisfaz as hipóteses do teorema de Cauchy-Kowalewski [Courant e Hilbert, 1989], podemos afirmar que a solução obtida é de fato a solução única do problema considerado. O caráter analítico da solução, além da elegância matemática e dependência explícita dos parâmetros, permite mitigar o erro referente ao método de solução da equação associada ao modelo. Este fato contribui para uma melhor avaliação da validade do modelo físico. Cumpre também observar a generalidade do método no sentido de que sua aplicação é facilmente estendida para problemas com um número arbitrário de grupos de energia e meio heterogêneo. Devemos salientar que os resultados podem ser obtidos por esta metodologia com a precisão desejada. Este fato pavimenta o caminho para a análise da influência da variação dos parâmetros na solução analítica.

Por outro lado, devemos recordar que a equação de cinética de reatores nucleares descreve o comportamento do fluxo de nêutrons devido a transientes de curta duração. Estas equações são classificadas como equações do tipo *stiff*, caracterizadas pela grande diferença de escala de tempo entre os nêutrons prontos e os atrasados. Devemos também acrescentar que este tipo de equação só pode ser resolvido pelos métodos numéricos conhecidos como A-estáveis. Os fatos supracitados, reforçam a relevância, bem como a contribuição da metodologia proposta na sua tarefa de determinação de solução, em forma analítica, para problemas na área de física de reatores nucleares.

Finalizando, cumpre destacar que o método discutido é uma técnica promissora para a solução deste tipo de problema. Portanto, focando a atenção nesta direção, sugerimos como trabalho futuro, a aplicação deste método em problemas fisicamente mais realistas, descritos por problemas multidimensionais de cinética, relevantes para o controle do comportamento do fluxo de nêutrons devido a eventuais ocorrências de transientes de curta duração durante a operação de um reator nuclear.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

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

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

Case, K. M., Hoffman, R., and Placzek, G., 1953. "Introduction to the theory of neutron diffusion". Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos.

Cassol, M., 2006. "Solução Analítica do Problema Bidimensional Transiente de Dispersão de Poluentes Atmosféricos pelo Método GITT Dupla", Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre.

Corno, S. E., Dulla, S., Picca, P., and Ravetto, P., 2008. "Analytical approach to the neutron kinetics of the non-homogeneous reactor", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 50, pp. 847–865.

Cotta, R. and Mikhaylov, M., 1997. "Heat Conduction Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation". John Wiley & Sons, Baffins Lane, Chinchester, England.

Cotta, R. M., 1993. "Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow". CRC Press, Florida.

Cotta, R. M., 1998. "The Integral Transform Method in Thermal and Fluids Science and Engineering". Begell House Inc., New York.

Courant, R. and Hilbert, D., 1989. "Methods of Mathematical Physics - II". John Wiley & Sons. Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J., 1976. "Nuclear Reactor Analysis". John Wiley & Sons, New York.

Dulla, S., Mund, E., and Ravetto, P., 2008. "The Quasi-Static Method Revisited", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 50, pp. 908–920.

Dulla, S., Ravetto, P., Picca, P., and Tomatis, D., 2007. "Analytical benchmarks for the kinetics of accelerator-driven systems", Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications.

Ganapol, B. D., 1992. "The Analytical Benchmark Library for Nuclear Engineering: PC Version". Idaho National Engineering Laboratory, Idaho Falls.

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

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

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

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

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

Moler, C. and Van Loan, C., 1978. "Nineteen dubious ways of computing the exponential of a matrix", **SIAM Review**, vol. 36, pp. 801–836. Nagaya, Y. and Kobayashi, K., 1995. "Solution of 1-D multi-group time-dependent diffusion using the coupled reactors theory", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 22, pp. 421–440.

Oliveira, F. L., 2008. "Solução Analítica da Cinética Espacial do Modelo de Difusão para Sistemas Homogêneos Subcríticos acionados por Fonte Externa", Dissertação de mestrado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN, São Paulo.

Oliveira, F. L., Maiorino, J. R., and Santos, R. S., 2007. "The analytical benchmark solution of spatial diffusion kinetics in source driven systems for homogeneous media", **International Nuclear Atlantic Conference - INAC**.

Ott, K. O. and Madell, J. T., 1966. "Quasistatic treatment of spatial phenomenon in reactor dynamics", Nuclear Science and Engineering, vol. 26.

Ozisik, M., 1974. "Heat Conduction". John Wiley & Sons, New York, 2nd edition.

Petersen, C. Z., 2008. "Aplicação da Transformada de Laplace para determinação de condições de contorno tipo albedo para cálculos neutrônicos", Dissertação de mestrado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T., 1999. "The State-of-the-art of the LTSN Method", Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications-International Conference, Madrid, Spain, vol. 2, pp. 1618– 1631.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T., and Gomes, M. G., 1999. "The One Dimensional LTSn Solution in a Slab with High Degree of Quadrature", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 26, pp. 925–934.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T., and Marona, D. V., 2008. "The LTSn solution of the transport equation for one-dimensional Cartesian geometry with c=1", **Kerntechnik**, vol. 73, pp. 57–60.

Stacey, W. M., 1967. "Modal Approximations: Theory and an Application to Reactor Physics". M.I.T Press, Massachusetts. Sutton, T. M. and Aviles, B. N., 1996. "Diffusion theory methods for spatial kinetics calculations", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 30, pp. 119–182.

Wortmann, S., 2003. "Formulação Semi-analítica para a Equação Transformada Resultante da Aplicação da GITT em Problemas Difusivos-Advectivos", Tese de doutorado, Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre.

Yasinsky, J. B. and Henry, A. F., 1965. "Some numerical experiments concerning space-time reactor kinetics behavior", **Nucl. Sci. Eng.**, vol. 22, pp. 171–181.