



COPPE/UFRJ

SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA USANDO O  
MÉTODO DA DECOMPOSIÇÃO E SOLUÇÕES ANALÍTICAS

Fabiano de Souza Prata

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva  
Aquilino Senra Martinez

Rio de Janeiro  
Fevereiro de 2011

SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA USANDO O  
MÉTODO DA DECOMPOSIÇÃO E SOLUÇÕES ANALÍTICAS

Fabiano de Souza Prata

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE  
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA  
NUCLEAR.

Examinada por:

---

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

---

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

---

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

---

Prof. Ricardo Carvalho de Barros, PH.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

FEVEREIRO DE 2011

de Souza Prata, Fabiano

Solução das equações de depleção isotópica usando o método da decomposição e soluções analíticas/Fabiano de Souza Prata. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2011.

XII, 86 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Nuclear, 2011.

Referências Bibliográficas: p. 73 – 74.

1. Equações de depleção.    2. Combustível Nuclear.
3. Actínídeos.    I. Carvalho da Silva, Fernando *et al.*  
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,  
Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Dedico este trabalho à Deus, e  
aos meus pais Neli A. Prata e  
Edna M.S. Prata.*

# Agradecimentos

Gostaria de agradecer a Deus, por todas as bênçãos que obtive ao longo da jornada da vida.

Aos meus pais, por todo amor e carinho que me proporcionaram e por todo o apoio que me deram na busca dos meus objetivos e desejos.

Aos professores Fernando Carvalho da Silva e Aquilino Senra Martinez pela paciência e dedicação em acompanhar-me na elaboração do presente trabalho.

Aos meus amigos do PEN, Daniela, Rafael, Samuel e Wanderson pela amizade acolhedora que me sustentou nos momentos difíceis e pelas conversas agradáveis e inúmeras risadas que experienciamos juntos. E a todos os outros amigos da vida pelo companheirismo e apoio.

Aos funcionários do PEN, pela imensa paciência e solicitude nos mais diferentes momentos.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) pelo suporte financeiro.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA USANDO O MÉTODO DA DECOMPOSIÇÃO E SOLUÇÕES ANALÍTICAS

Fabiano de Souza Prata

Fevereiro/2011

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Programa: Engenharia Nuclear

Nesta dissertação, propomos uma nova formulação para se obterem as soluções das equações de depleção isotópica em uma cadeia de actínídeos onde existem realimentações por meio de reações do tipo  $(n, 2n)$ . A solução destas equações, ou seja, a obtenção das concentrações isotópicas no núcleo do reator, é a tarefa que consome mais tempo de computação nos sistemas de cálculo que simulam o núcleo de reatores nucleares, sendo de interesse para a indústria nuclear que este tipo de cálculo seja feito da forma mais rápida possível, sem que haja perda na precisão dos resultados.

Na parte da cadeia onde existe realimentação utilizamos o método da decomposição e no restante da cadeia empregamos as soluções analíticas. Com as concentrações calculadas, podemos obter as concentrações médias de forma analítica, cujo resultado é extremamente útil para o cálculo das concentrações dos produtos de fissão.

Os resultados desta formulação mostraram que a precisão dos cálculos foi satisfatória e a redução no tempo computacional foi extremamente elevada.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

SOLUTION OF THE EQUATIONS OF ISOTOPIC DEPLETION USING THE  
DECOMPOSITION METHOD AND ANALYTICAL SOLUTIONS

Fabiano de Souza Prata

February/2011

Advisors: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Department: Nuclear Engineering

In this dissertation a new formulation is being proposed to obtain solutions of the isotopic depletion equations in a chain of actinides where there are feedbacks through  $(n, 2n)$  reactions. The solution of these equations, which means the calculation of isotopic concentrations in the reactor core, is the task that consumes more computing time in calculating systems that simulate the core of nuclear reactors, being of interest to the nuclear industry that this type of calculation is made as fast as possible, without losing the accuracy of results.

In part of the chain where there is feedback we used the decomposition method and in the other part of the chain we used the analytical solutions. With the calculated concentrations, we can obtain the average concentration in an analytical way, which results are extremely useful for calculating the concentrations fission products.

The results of this formulation showed that the accuracy of the calculations was satisfactory and the reduction in computing time was extremely high.

# Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 As Equações de Depleção Isotópica</b>	<b>5</b>
2.1 Introdução . . . . .	5
2.2 Actinídeos . . . . .	5
2.3 Produtos de Fissão . . . . .	9
2.3.1 A cadeia do produto de fissão $^{135}\text{Xe}$ . . . . .	11
2.4 Simplificações na equação de depleção . . . . .	14
2.4.1 Dependência energética-Formulação Multigrupo . . . . .	14
2.4.2 Dependência espacial-Métodos Nodais . . . . .	16
2.4.3 Dependência temporal-Aproximação quase-estática . . . . .	19
<b>3 Alguns Métodos de Solução</b>	<b>21</b>
3.1 Introdução . . . . .	21
3.2 Equações de Bateman . . . . .	21
3.3 Matriz Exponencial . . . . .	23
3.3.1 Métodos de decomposição de matriz . . . . .	23
3.3.2 Potenciação e polinômios ortogonais . . . . .	26
<b>4 Método Proposto</b>	<b>28</b>
4.1 Introdução . . . . .	28



4.2	Cadeias de depleção . . . . .	29
4.2.1	Cadeia de depleção dos actínídeos . . . . .	29
4.2.2	Cadeias de depleção dos produtos de fissão . . . . .	31
4.3	Equações de depleção . . . . .	33
4.3.1	Equações de depleção dos actínídeos . . . . .	33
4.3.2	Equações de depleção dos produtos de fissão . . . . .	37
4.4	Método da Decomposição . . . . .	40
4.5	Soluções Analíticas . . . . .	42
4.5.1	Soluções analíticas dos Actínídeos . . . . .	43
4.5.2	Soluções analíticas dos Produtos de fissão . . . . .	47
4.6	Aspectos gerais do método . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>56</b>
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>71</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>73</b>
<b>A</b>	<b>Coefficientes das equações de depleção</b>	<b>75</b>
A.1	Matriz de depleção dos actínídeos . . . . .	75
A.2	Produtos de fissão . . . . .	80

# Lista de Figuras

2.1	Cadeia de Depleção de Actinídeos . . . . .	6
2.2	Formação e desaparecimento do actínídeo X . . . . .	7
2.3	Cadeia do $^{135}\text{Xe}$ . . . . .	12
2.4	Cadeia do Xenônio simplificada . . . . .	12
2.5	Discretização da energia . . . . .	15
2.6	Nodo n arbitrário . . . . .	17
2.7	Discretização do período de queima . . . . .	20
4.1	Cadeia de Actinídeos utilizada nesta dissertação . . . . .	30
4.2	<i>Cadeia do Molibdênio-95</i> . . . . .	31
4.3	<i>Cadeia do Ródio-103</i> . . . . .	31
4.4	<i>Cadeia do Ródio-105</i> . . . . .	31
4.5	<i>Cadeia do Xenônio-131</i> . . . . .	31
4.6	<i>Cadeia do Xenônio-135</i> . . . . .	32
4.7	<i>Cadeia do Praseodímio-143</i> . . . . .	32
4.8	<i>Cadeia do Samário-149</i> . . . . .	32
4.9	<i>Cadeia do Gadolínio-155</i> . . . . .	32
5.1	Distribuição axial de nodos no décimo sétimo elemento combustível . . . . .	59
5.2	Concentração do Xenônio com o tempo . . . . .	62
5.3	Concentração do Samário com o tempo . . . . .	62
5.4	Concentração do U235 com o tempo . . . . .	63
5.5	Concentração do U236 com o tempo . . . . .	63

5.6	Concentração do U238 com o tempo . . . . .	64
5.7	Concentração do Np237 com o tempo . . . . .	64
5.8	Concentração do Pu242 com o tempo . . . . .	65
5.9	Concentração do Am243 com o tempo . . . . .	65
5.10	Concentração do Cm242 com o tempo . . . . .	66
5.11	Concentração do Cm244 com o tempo . . . . .	66
5.12	Distribuição de potência normalizada no instante 3 dias . . . . .	68
5.13	Distribuição de potência normalizada no instante 6 dias . . . . .	69
5.14	Distribuição de potência normalizada no instante 100 dias . . . . .	69
5.15	Distribuição de potência normalizada no instante 200 dias . . . . .	70

# Lista de Tabelas

2.1	<i>Percentual de produtos de fissão e constantes de decaimento . . . . .</i>	13
5.1	<i>Tempo computacional gasto no módulo de depleção . . . . .</i>	58
5.2	<i>Concentrações para o Am243 no instante 3 dias . . . . .</i>	60
5.3	<i>Concentrações para o Am243 no instante 6 dias . . . . .</i>	60
5.4	<i>Concentrações do Xe135 e do Sm149 para os instantes de queima . .</i>	61
5.5	<i>Concentrações de boro com a queima . . . . .</i>	67
A.1	<i>Rendimento dos produtos de fissão . . . . .</i>	86

# Capítulo 1

## Introdução

As mudanças nas propriedades de um reator nuclear ao longo de seu ciclo de operação, devido às reações nucleares, são determinadas pelas alterações nas composições isotópicas do combustível e na maneira como estas mudanças são tratadas. Vários núclídeos resultantes da queima do combustível são transmutados devido à captura neutrônica e subsequente decaimento. Para um reator cujo combustível é o urânio, este processo irá gerar uma variedade de elementos transurânicos na série de actínídeos da tabela periódica. As reações de fissão reduzirão as concentrações dos núclídeos físseis tais como  $^{235}\text{U}$  e  $^{239}\text{Pu}$ , e neste processo são produzidos, na maioria dos casos, dois núcleos menores chamados de produtos de fissão. Alguns destes produtos de fissão são caracterizados por altas seções de choque de absorção, tais como o  $^{135}\text{Xe}$ , podendo afetar de maneira significativa o fator de multiplicação do núcleo e conseqüentemente, fazer o reator ficar subcrítico.

A importância em conhecermos as concentrações dos núclídeos presentes no núcleo durante a operação do reator, consiste no fato de que tais mudanças na composição do núcleo podem afetar o fluxo de nêutrons, assim como a reatividade e a distribuição de potência. A reação de fissão que ocorre no combustível produz dois efeitos negativos na reatividade: o número de núcleos é reduzido e produtos de fissão são gerados, alguns com seções de choque de captura significativas. A conversão de um núclídeo fértil em um núclídeo não-físsil pode ter um efeito negativo ou positivo na reatividade, dependendo das seções de choque dos isótopos

envolvidos, mas a transmutação de um isótopo fértil em um isótopo físsil tem um efeito positivo na reatividade. Dependendo do enriquecimento inicial, o processo de decaimento-transmutação geralmente produz mais núclídeos físsis do que aqueles que são destruídos no início do ciclo, causando um efeito positivo na reatividade, até a concentração do núclídeo físsil transmutado atingir o equilíbrio. Por exemplo, a criação do  $^{239}\text{Pu}$  no início do ciclo de operação de um reator PWR produz um efeito positivo na reatividade que pode ser maior do que o efeito negativo devido à depleção do  $^{235}\text{U}$  e o aparecimento dos produtos de fissão [1].

A depleção do combustível e as ações de controle, tais como a movimentação da barra de controle e a alteração na concentração de boro solúvel que são mecanismos utilizados sempre que o reator se torna subcrítico ou supercrítico, com o objetivo do reator retornar a operar no regime crítico, afetam a distribuição de potência no núcleo do reator. Como a depleção do combustível será maior em regiões do núcleo onde a distribuição de potência possui seu maior valor, haverá um pico na distribuição de potência decorrente da reatividade positiva promovida pelo início do ciclo de operação. Quando houver efeitos de reatividade negativa, esses picos localizar-se-ão em regiões onde o fator de multiplicação infinito é maior. Esses picos na distribuição de potência, decorrentes da depleção do combustível, deverão ser compensados pela inserção das barras de controle, porém o próprio movimento das barras para compensar os efeitos da reatividade ocasionados pela depleção, alteram a distribuição de potência. O estudo desses efeitos na distribuição de potência, devidos à depleção, é uma das tarefas mais importantes do Físico de Reatores.

A solução das equações de depleção isotópica, ou seja, a obtenção das concentrações isotópicas no núcleo do reator, é a tarefa que consome mais tempo de computação nos sistemas de cálculo que simulam o núcleo de reatores nucleares. Sendo assim, é de interesse que este tipo de cálculo seja feito da forma mais rápida possível, sem que haja perda na precisão dos resultados. Isto se justifica, pois os cálculos de otimização do núcleo para um novo ciclo de operação consome muito tempo e quanto mais veloz for o sistema de cálculo, mais configurações de núcleos podem ser

simuladas e, conseqüentemente, a obtenção de um núcleo otimizado torna-se mais provável de ser alcançado.

Nesta dissertação de mestrado, está sendo proposto um método para resolver as equações de depleção isotópica, encontradas nos sistemas que simulam núcleos de reatores tipo PWR, que combina o método de decomposição de matrizes com soluções analíticas. Analisaremos uma cadeia de actínídeos fechada, composta por 17 actínídeos onde na sua parte inicial existe reações de realimentação. Serão analisados também os produtos de fissão decorrentes da queima dos nuclídeos presentes no combustível. O objetivo principal será calcular as concentrações isotópicas, tentando minimizar o tempo computacional associado ao respectivo cálculo.

No capítulo 2, são apresentadas as equações de depleção correspondentes aos actínídeos e aos produtos de fissão, utilizando equações de balanço entre produção e desaparecimento do nuclídeo a ser analisado. Também é feita uma breve discussão sobre as aproximações utilizadas nas equações de depleção para lidar com a complexidade da mútua dependência entre fluxo de nêutrons e concentração isotópica, dependência energética e espacial caracterizando as equações.

No capítulo 3, é feita uma breve revisão bibliográfica sobre alguns dos métodos utilizados para a resolução das equações de depleção. É apresentada a formulação analítica, proposta originalmente por Bateman[2], e a proposta numérica, que em geral exige um maior tempo computacional de cálculo.

No capítulo 4, são apresentadas as cadeias dos actínídeos e dos produtos de fissão utilizadas nesta dissertação e o método proposto de resolução das equações de depleção isotópicas caracterizando estes nuclídeos. O método consiste na decomposição das equações acopladas que representam a realimentação, associado a soluções analíticas para os demais nuclídeos pertencentes a cadeia dos actínídeos, assim como para os produtos de fissão. As concentrações que servem como fonte para os produtos de fissão são tratadas como médias no intervalo de queima considerado, tornando possível a resolução das equações desses produtos de maneira analítica.

No capítulo 5, são apresentados os resultados numéricos obtidos, para o cálculo

das concentrações, utilizando o método descrito no capítulo 4.

No capítulo 6, são apresentadas as conclusões relevantes desta dissertação, assim como as sugestões para possíveis trabalhos futuros.



# Capítulo 2

## As Equações de Depleção Isotópica

### 2.1 Introdução

As equações que descrevem o comportamento temporal das concentrações isotópicas dos núclídeos que compõem o combustível nuclear, os produtos de fissão e os venenos queimáveis, no núcleo do reator, são chamadas de equações de depleção isotópicas. Estas equações são vitais para o efetivo controle do reator, uma vez que a influência das concentrações em parâmetros essenciais do reator, tais como a reatividade, podem levá-lo a um estado supercrítico ou subcrítico de operação.

Neste capítulo abordaremos as equações, de forma geral, caracterizando tanto os actínídeos presentes no elemento combustível, quanto os produtos de fissão decorrentes da queima. São analisadas, brevemente, as principais simplificações utilizadas para lidar com a dependência energética, espacial e temporal das mesmas.

### 2.2 Actínídeos

As equações de depleção caracterizando os isótopos a serem monitorados no reator, dependerão do combustível particular utilizado no núcleo. As cadeias estudadas, em geral, são simplificadas para facilitar o tratamento matemático, sendo desconsiderados elementos que possuem baixos valores de meia-vida assim como são desconsideradas algumas reações que embora ocorram, não contribuem significativa-

mente no resultado final do cálculo das concentrações isotópicas. A figura 2.1 mostra a cadeia de alguns actinídeos de interesse geralmente considerados em reatores cujo combustível é o urânio [3].

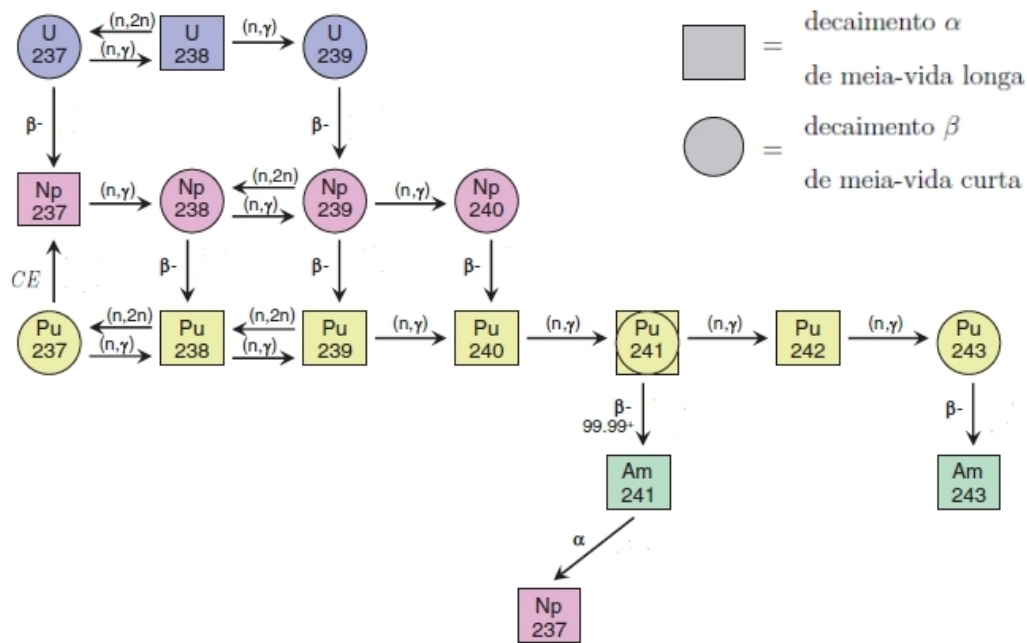


Figura 2.1: Cadeia de Depleção de Actinídeos

As equações de depleção descrevendo as concentrações dos isótopos no núcleo do reator podem ser derivadas usando um balanço entre perdas e ganhos. De uma maneira geral, considere um nuclídeo X com um número de massa A que compõe uma determinada cadeia de actinídeos. Se  $N_{XA}(\vec{r}, t)$  for a sua concentração em um dado instante  $t$ , então as equações de depleção descrevendo as taxas de mudança que ocorrem com este isótopo, esquematizadas na figura 2.2 serão dadas por [1]

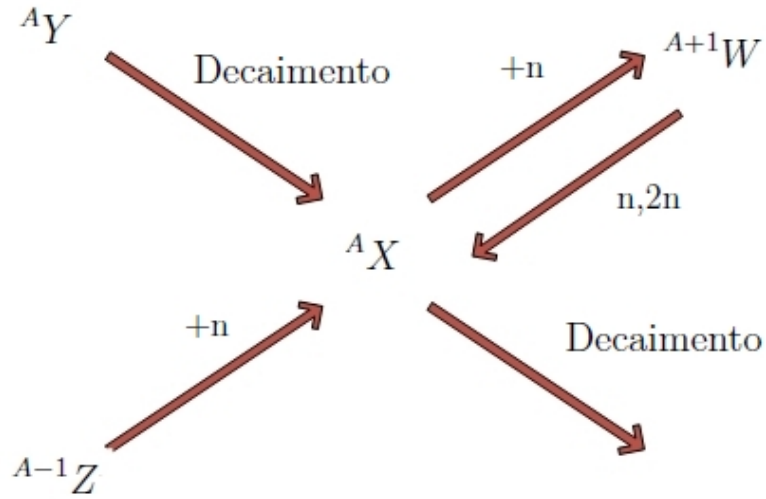


Figura 2.2: Formação e desaparecimento do actinídeo X

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} N_{XA}(\vec{r}, t) = & -N_{XA}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_a^{XA}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE - \lambda_{XA} N_{XA}(\vec{r}, t) \\
 & + N_{ZA-1}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_\gamma^{ZA-1}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \\
 & + N_{WA+1}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_{(n,2n)}^{WA+1}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \\
 & + \lambda_{YA} N_{YA}(\vec{r}, t)
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

onde:

$N_u(\vec{r}, t) \equiv$  Concentração isotópica do nuclídeo u  $u = X, Y, Z, W$

$\lambda_u \equiv$  Constante de decaimento radioativo do nuclídeo u

$\sigma_a^u \equiv$  Seção de choque microscópica de absorção do nuclídeo u

$\sigma_\gamma^u \equiv$  Seção de choque microscópica de captura do nuclídeo u

$\sigma_{(n,2n)}^u \equiv$  Seção de choque microscópica de reação  $(n, 2n)$  do nuclídeo u

$\sigma_a^u(\sigma_f^u + \sigma_\gamma^u + \sigma_{(n,2n)}^n + \dots) \equiv$  seção de choque microscópica de absorção do nuclídeo u

$\sigma_f^u \equiv$  Seção de choque microscópica de fissão do nuclídeo u

$\Phi(\vec{r}, E, t) \equiv$  fluxo de nêutrons

$\lambda_Y N_Y(\vec{r}, t)$  ganho devido ao decaimento de Y para X

$N_{ZA-1}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_\gamma^{ZA-1}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE$  ganho devido à transmutação de Z para X via captura de nêutrons

$N_{WA+1}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_{(n,2n)}^{WA+1}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE$  ganho devido à reação  $(n,2n)$  do nuclídeo W

$N_{XA}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_a^{XA}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE$  perda devido à captura de nêutrons por X

$\lambda_{XA} N_{XA}(\vec{r}, t)$  perda devido ao decaimento radioativo de X

Note que a equação (2.1) é não-linear e heterogênea, uma vez que para determinarmos as concentrações isotópicas, precisamos conhecer o fluxo de nêutrons, porém os mesmos não possuem apenas uma dependência temporal e espacial, mas dependem também das próprias concentrações isotópicas. O problema da não-linearidade é contornada usando uma aproximação chamada Aproximação Quase-Estática. Na seção 2.4 abordaremos melhor essa questão.

Para exemplificar, podemos utilizar a equação (2.1) para escrevermos as equações de depleção para os três primeiros núclídeos da cadeia esquematizada na figura 2.2. Sendo assim, teríamos as seguintes equações:

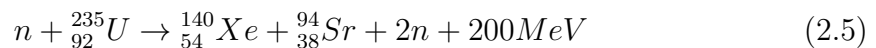
$$\begin{aligned}
\frac{\partial N_{U237}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -N_{U237}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_a^{U237}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \\
&+ N_{U238}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_{n,2n}^{U238}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \\
&- \lambda_{U237} N_{U237}(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{2.2}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial N_{U238}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -N_{U238}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_a^{U238}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \\
&+ N_{U237}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_\gamma^{U237}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \\
&- N_{U238}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_{n,2n}^{U238}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE
\end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial N_{U239}(\vec{r}, t)}{\partial t} &= +N_{U239}(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_\gamma^{U238}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \\
&- \lambda_{U239} N_{U239}(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{2.4}$$

## 2.3 Produtos de Fissão

À medida que o combustível nuclear vai sendo queimado, as inúmeras fissões que ocorrem no núcleo produzem diversos pares de fragmentos de fissão. Na maioria dos casos um deles possui massa muito maior do que o outro. Uma reação típica de fissão é



Estes fragmentos nos quais o núcleo se divide quando é fissionado são radioativos e acabam gerando cadeias de isótopos quando eles decaem para um núcleo estável. Alguns desses produtos de fissão possuem seções de choque de absorção neutrônica com valores muito elevados, variando de algumas dezenas de barns até milhões de barns. Podemos dividir os produtos de fissão (aproximadamente) em duas classes distintas, saturados e não-saturados.

Os produtos de fissão saturados são aqueles que possuem seções de choque altas de tal forma que passado um breve período de tempo as suas respectivas taxas de produção são equilibradas com as suas próprias queimas, sendo atingida uma concentração de equilíbrio. O exemplo mais significativo desta classe é o  $^{135}\text{Xe}$ .

Os produtos de fissão não-saturados, por possuírem seções de choque pequenas se comparados aos saturados, alcançarão a saturação com um intervalo de tempo maior ou efetivamente não atingirão a concentração de equilíbrio. Por exemplo, uma classe de produtos de fissão que possuem uma seção de choque média de 80 barns, sofre saturação em 50 a 100 dias de operação (considerando um reator PWR), enquanto aqueles que possuem uma seção de choque média de 50 barns alcançarão a concentração de equilíbrio após passados 6 meses aproximadamente. Os produtos de fissão com uma seção de choque média de 30 barns não saturarão.

O acúmulo desses produtos de fissão podem afetar de maneira significativa o fator de multiplicação, interferindo na operação do reator. Sendo assim, é extremamente necessário estimarmos os efeitos dos produtos de fissão, sendo preciso para isso calcularmos as concentrações de centenas de isótopos em qualquer instante de tempo durante a operação do reator. Utilizando equações de balanço, assim como fizemos para os actínídeos, podemos escrever de maneira geral a taxa de criação de um produto de fissão genérico  $i$ , sendo gerado de uma cadeia onde existam  $I_f$  actínídeos

[1]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_i(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \sum_{j=1}^{I_f} \Gamma_j^i N_j(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_f^j(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE + \lambda_{i-1} N_{i-1}(\vec{r}, t) \\ &- \left( \lambda_i + \int_0^\infty \sigma_a^i(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \right) N_i(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde  $i = I_{f+1}, I_{\text{total}}$ , sendo  $I_{\text{total}}$  o número total de núclídeos considerados (actínídeos e produtos de fissão). O termo  $\Gamma_j^i$  representa o número médio de núclídeos  $i$  criados por fissão, na posição  $\vec{r}$  e no instante  $t$  devido à fissão do núclídeo  $j$ . O termo  $\lambda_{i-1} N_{i-1}(\vec{r}, t)$  representa a taxa de criação do núclídeo  $i$  devido ao decaimento radioativo de algum núclídeo  $i-1$ . Existem diversas cadeias de produtos de fissão que possuem altas produções de fragmentos (alto valor para  $\Gamma_j^i$ ) e seções de choque de absorção elevadas. Uma das mais importantes cadeias, do ponto de vista de criticidade e controle é aquela que contém o produto de fissão  $^{135}\text{Xe}$ . Vamos analisá-la na próxima seção.

### 2.3.1 A cadeia do produto de fissão $^{135}\text{Xe}$

Quando consideramos a flutuação de potência do reator para grandes períodos de tempo, o efeito do xenônio  $^{135}\text{Xe}$  é muito importante, pois ele apresenta uma alta seção de choque de absorção e uma fração de produção resultante da fissão consideravelmente alta, podendo afetar significativamente o controle de reatividade do reator. O xenônio pode ser produzido diretamente como um dos produtos de uma reação de fissão, mas também pode ser resultado do decaimento beta do iodo-135 (meia-vida de 6.7 horas) e por sua vez ele próprio é radioativo (meia vida de 9.2 horas). Parte da cadeia do xenônio é mostrada na figura 2.3.

Esta cadeia pode ser simplificada assumindo que o decaimento do  $^{135}\text{Te}$  para o  $^{135}\text{I}$  é imediata, pelo fato de sua meia-vida possuir o valor de 19.2 segundos, ou seja, consideraremos que o  $^{135}\text{I}$  seja formado diretamente apenas da fissão. Além disso, vamos ignorar o estado meta-estável do  $^{135m}\text{Xe}$ , considerando que todo o

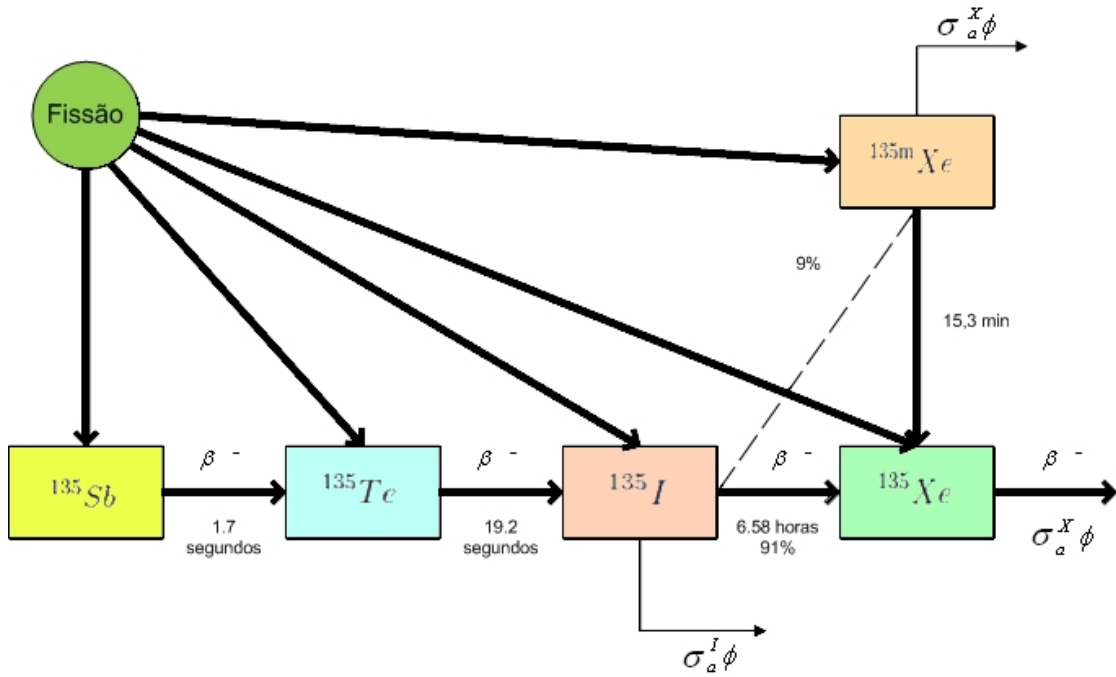


Figura 2.3: Cadeia do  $^{135}\text{Xe}$

decaimento resultante do  $^{135}\text{I}$  resulte no estado fundamental do  $^{135}\text{Xe}$ . Com essas simplificações, a cadeia agora a ser estudada em substituição àquela apresentada na figura 2.3 está mostrada na figura 2.4

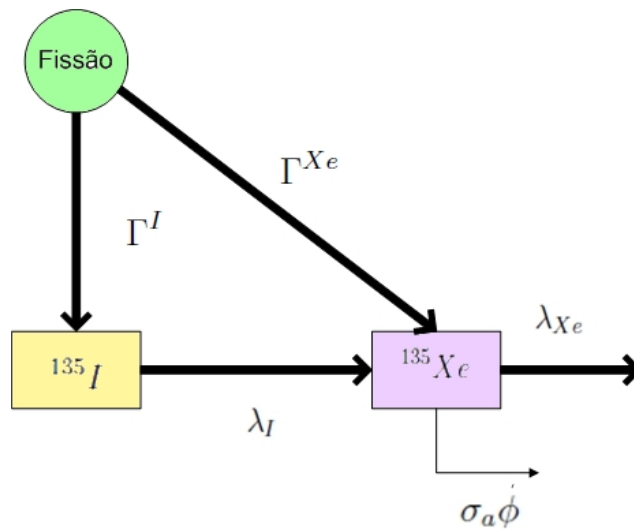


Figura 2.4: Cadeia do Xenônio simplificada



Utilizando um raciocínio análogo àquele utilizado na apresentação da equação (2.6), podemos descrever as concentrações do iodo-135 e do xenônio-135. Se  $N_{I135}(\vec{r}, t)$  e  $N_{Xe135}(\vec{r}, t)$  representarem as concentrações do  $^{135}I$  e  $^{135}Xe$  em uma posição  $\vec{r}$  no reator, podemos escrever as equações representando as taxas de mudança desses dois núclídeos utilizando a cadeia simplificada da figura 2.4 como

### **Iodo**

$$\frac{\partial N_{I135}(\vec{r}, t)}{\partial t} = \Gamma^I N_j(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_f(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE - \lambda_{I135} N_{I135}(\vec{r}, t) \quad (2.7)$$

### **Xenônio**

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{Xe135}(\vec{r}, t)}{\partial t} = & \Gamma^{Xe} N_j(\vec{r}, t) \int_0^\infty \sigma_f(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE + \lambda_{I135} N_{I135}(\vec{r}, t) \\ & - \left( \lambda^{Xe} + \int_0^\infty \sigma_a^{Xe}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \right) N_{Xe135}(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

onde  $\lambda_{I135}$  e  $\lambda_{Xe135}$  são as constantes de decaimento beta dos núclídeos  $^{135}I$  e  $^{135}Xe$  respectivamente. Apesar do iodo-135 também absorver nêutrons, na equação (2.7), a parcela correspondente à essa absorção foi desprezada em virtude deste núclídeo apresentar baixa seção de choque de absorção, apresentando somente um valor considerável para fluxos de nêutrons elevados ( $\Phi > 10^{16} cm^{-2} sec^{-1}$ ). A tabela 2.1 mostra os valores para as frações de produção de fissão assim como para as constantes de decaimento [4].

Tabela 2.1: *Percentual de produtos de fissão e constantes de decaimento*

Percentual de fissão	$^{233}U$	$^{235}U$	$^{239}Pu$	$^{241}Pu$	Constante de decaimento
$\Gamma^I$	0.0488	0.0638	0.0610	0.0769	$\lambda_{I135} = 0.1035h^{-1}$
$\Gamma^{Xe}$	0.0136	0.0022	0.0108	0.0025	$\lambda_{Xe135} = 0.0753h^{-1}$

Note que as equações (2.7) e (2.8) são equações não-lineares, assim como já havíamos obtido para os actínídeos, pois as concentrações dos produtos de fissão dependem do fluxo de nêutrons, sendo que o próprio fluxo depende das concentrações dos nuclídeos. Além disso, elas mostram uma complicação adicional, já que devemos conhecer também as concentrações dos nuclídeos que fissionados produzem o produto de fissão a ser considerado. Assim, essas equações são aclopadas com aquelas das cadeias de actínídeos e só podem ser resolvidas se conhecermos as concentrações destes actínídeos. Mais adiante abordaremos brevemente como tratar esse problema.

## 2.4 Simplificações na equação de depleção

Na seção 2.2, havíamos comentado sobre a não-linearidade e a não-homogeneidade da equação de depleção (2.1), caracterizando as mudanças que um dado elemento sofre em virtude de sua exposição ao fluxo de nêutrons no núcleo do reator. Para analisarmos com um pouco mais de detalhes esta equação, iremos fazer uso de algumas aproximações que facilitam o tratamento matemático da mesma. Como notamos nesta equação, alguns termos dependem somente da energia, outros do espaço e do tempo, enquanto outros dependem destas três variáveis independentes. Vamos analisar a discretização, em geral, utilizada nos códigos de depleção existentes para lidar com esta equação.

### 2.4.1 Dependência energética-Formulação Multigrupo

Na formulação multigrupo a variável  $E$ , caracterizando a energia do nêutron, ao invés de ser tratada como uma variável contínua, é discretizada em intervalos de energia ou grupos. Ou seja, o espectro de energia dos neutrons é dividido em  $G$  *grupos de energia* contíguos, de acordo com o esquema da figura 2.5:

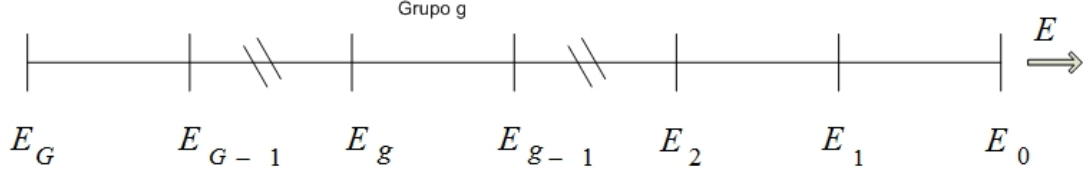


Figura 2.5: Discretização da energia

Considere a equação (2.1) que representa o balanço de um dado elemento inserido em uma cadeia. Discretizando a variável  $E$  em grupos de energia, a equação (2.1) assume a forma:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} N_{XA}(\vec{r}, t) &= -N_{XA}(\vec{r}, t) \sum_{g=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_a^{XA}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE - \lambda_{XA} N_{XA}(\vec{r}, t) \\
&+ N_{ZA-1}(\vec{r}, t) \sum_{g=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_\gamma^{ZA-1}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE + \lambda_{YA} N_{YA}(\vec{r}, t) \\
&+ N_{WA+1}(\vec{r}, t) \sum_{g'=1}^G \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_{n,2n}^{WA+1}(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \quad (2.9)
\end{aligned}$$

Convém lembrar que a maioria dos códigos computacionais simulando núcleos de reatores utilizam abordagem multigrupo fazendo uso de apenas alguns grupos de energia.

Definindo o fluxo de nêutrons no grupo  $g$  como

$$\Phi_g(\vec{r}, t) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\vec{r}, E, t) dE \quad (2.10)$$

Podemos definir as seções de choque microscópicas de grupo:

$$\sigma_{ag}^X A \equiv \frac{1}{\Phi_g(\vec{r}, t)} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_a^X(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \quad (2.11)$$

$$\sigma_{\gamma g}^{ZA-1} \equiv \frac{1}{\Phi_g(\vec{r}, t)} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{\gamma g}^Z(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \quad (2.12)$$

$$\sigma_{(n,2n)g}^{WA+1} \equiv \frac{1}{\Phi_g(\vec{r}, t)} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{n,2n}^W(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE \quad (2.13)$$

Substituindo as equações (2.11) a (2.13) na equação (2.9) obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N^{XA}(\vec{r}, t)}{\partial t} = & -N_{XA}(\vec{r}, t) \left( \sum_{g=1}^G \sigma_{ag}^{XA} \Phi_g(\vec{r}, t) + \lambda^{XA} \right) + N_{WA+1}(\vec{r}, t) \sum_{g=1}^G \sigma_{(n,2n)g}^{WA+1} \Phi_g(\vec{r}, t) \\ & + \lambda^{YA} N_{YA}(\vec{r}, t) + N_{ZA-1}(\vec{r}, t) \sum_{g=1}^G \sigma_{\gamma g}^{ZA-1} \Phi_g(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (2.14)$$

## 2.4.2 Dependência espacial-Métodos Nodais

Existem, na literatura, alguns métodos de discretização espacial cujo objetivo principal é tratar regiões onde os parâmetros nucleares são considerados uniformes, ou seja, nesses métodos o núcleo do reator heterogêneo tem o seu domínio espacial discretizado em regiões homogêneas. Os métodos mais utilizados são os métodos nodais, diferenças finitas e elementos finitos. Em nosso trabalho os fluxos usados nas equações de depleção foram obtidos utilizando o Método de Expansão Nodal (NEM) [5] para tratarmos a dependência espacial da equação (2.14). No NEM o domínio espacial do núcleo do reator é dividido em paralelepípedos adjacentes chamados nodos (figura 2.6 ).

Nesse método, a equação de balanço nodal é obtida através da integração da equação da continuidade de nêutrons no volume  $V_n = a_x^n a_y^n a_z^n$  de um nodo e subsequente divisão por  $V_n$ . Desta equação são calculados os fluxos médios nos nodos

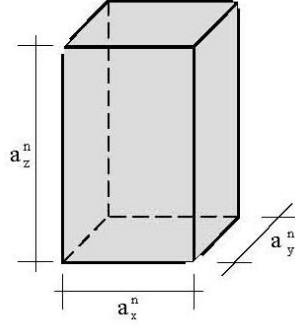


Figura 2.6: Nó n arbitrário

$\bar{\Phi}_g^n(t_\ell)$ . Esse fluxo médio no nó n é definido por:

$$\bar{\Phi}_g^n(t) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Phi_g(\vec{r}, t) dV \quad (2.15)$$

Utilizando uma idéia análoga, podemos integrar a equação (2.14) no volume  $V_n = a_x^n a_y^n a_z^n$  de um nó n e posteriormente dividi-la pelo volume do nó. Assim

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_{XA}(\vec{r}, t) dV \right) &= - \sum_{g=1}^G \sigma_{ag}^{XA} \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_{XA}(\vec{r}, t) \Phi_g(\vec{r}, t) dV \\ &- \lambda^{XA} \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_{XA}(\vec{r}, t) dV + \sum_{g=1}^G \sigma_{\gamma g}^{ZA-1} \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_{ZA-1}(\vec{r}, t) \Phi_g(\vec{r}, t) dV \\ &+ \lambda^{YA} \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_{YA}(\vec{r}, t) dV + \sum_{g=1}^G \sigma_{(n,2n)g}^{WA+1} \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_{WA+1}(\vec{r}, t) \Phi_g(\vec{r}, t) dV \end{aligned} \quad (2.16)$$

As concentrações isotópicas dos núclídeos no nó n serão tais que  $N_X(\vec{r}, t) = N_X^n(t)$  para  $\vec{r} \in$  nó n. Ou seja, neste caso o nó é assumido ser homogêneo. Consequentemente,

$$N_u^n(t) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_u(\vec{r}, t) dV; \quad u = X, Y, Z \quad (2.17)$$

logo

$$\frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_u(\vec{r}, t) \Phi_g(\vec{r}, t) dV = N_u^n(t) \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Phi_g(\vec{r}, t) dV = \bar{\Phi}_g^n(t) N_u^n(t) \quad (2.18)$$

Utilizando as equações (2.17) e (2.18) na equação 2.16 obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}N_{XA}^n(t) &= -\left(\sum_{g=1}^G\sigma_{ag}^{XA} + \lambda^{XA}\right)N_{XA}^n(t)\bar{\Phi}_g^n(t) + \sum_{g=1}^G\sigma_{\gamma g}^{ZA-1}N_{ZA-1}^n(t)\bar{\Phi}_g^n(t) \\ &\quad + \lambda^{YA}N_{YA}^n(t) + \sum_{g=1}^G\sigma_{(n,2n)g}^{WA+1}N_{WA+1}^n(t)\bar{\Phi}_g^n(t) \end{aligned} \quad (2.19)$$

Considerando que exista um total de  $I_f$  actínídeos na cadeia de tal forma que eles estejam numerados, podemos escrever uma equação compacta abrangendo todos os nuclídeos, tal seja:

$$\frac{d}{dt}N_i^n(t) = \sum_{j=1}^{I_f} h_{ij}^n(t)N_j^n(t) \quad (2.20)$$

ou na forma matricial, podemos escrever:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} N_1^n(t) \\ N_2^n(t) \\ N_3^n(t) \\ \vdots \\ N_{I_f}^n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11}^n(t) & h_{12}^n(t) & h_{13}^n(t) & \dots & h_{1I_f}^n(t) \\ h_{21}^n(t) & h_{22}^n(t) & h_{23}^n(t) & \dots & \vdots \\ h_{31}^n(t) & h_{32}^n(t) & h_{33}^n(t) & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{I_f 1}^n(t) & \dots & \dots & \dots & h_{I_f I_f}^n(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1^n(t) \\ N_2^n(t) \\ N_3^n(t) \\ \vdots \\ N_{I_f}^n(t) \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

sendo os coeficientes deste conjunto de equações dados por

$$h_{ij}^n(t) = \begin{cases} \Upsilon_{ij} \lambda_{ij} & \text{ou } \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \sigma_{cg}^i \bar{\Phi}_g^n(t) \quad \text{para } j < i \\ -\left( \lambda_i + \sum_{g=1}^G \sigma_{ag}^i \bar{\Phi}_g^n(t) \right) & \text{para } j = i \\ \Upsilon_{ij} \lambda_{ij} & \text{ou } \sigma_{(n,2n)g}^j \bar{\Phi}_g^n(t) \quad \text{para } j > i \end{cases}$$

onde  $\Upsilon_{ij}$  representa o percentual com que o nuclídeo  $j$  produz o nuclídeo  $i$  por decaimento ou por captura de nêutrons. Além disso,  $h_{ij}$  para  $j > i$  representa as possíveis reações de realimentação existentes (reações (n,2n) e decaimentos alfa). A matriz da equação (2.21) é chamada de matriz de evolução do sistema, ou matriz de depleção.

### 2.4.3 Dependência temporal-Aproximação quase-estática

Apesar da equação (2.1) ter sido simplificada pelo uso da formulação multigrupo e pelo uso do método nodal NEM, para obtermos as soluções das concentrações ainda é necessário que conheçamos o fluxo de nêutrons, que por sua vez depende das próprias concentrações. Como essas equações estão acopladas, o problema relacionado ao tratamento da dependência temporal da depleção e as mudanças na distribuição do fluxo de nêutrons geralmente é abordado através da separação do cálculo de depleção e do cálculo do fluxo neutrônico. Assim, ao invés de termos de resolver a equação de difusão de nêutrons simultaneamente com as equações de depleção, é adotada, em geral, uma aproximação chamada de aproximação quase-estática. Nesta aproximação, o período de queima a ser analisado é dividido em  $L$  intervalos de tempo, chamados de intervalos de queima ao longo dos quais a distribuição de fluxo de nêutrons é mantida constante. Na figura 2.7 estão esquematizados os  $L$  intervalos de queima.

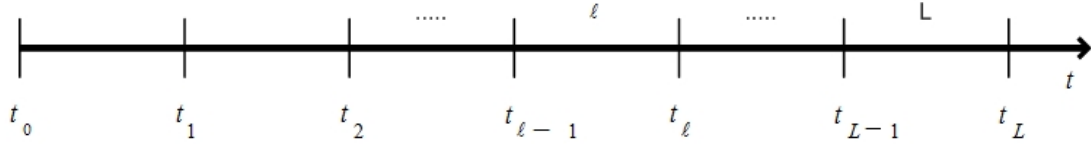


Figura 2.7: Discretização do período de queima

onde:

$[t_0, t_L] \equiv$  Período de Queima

$[t_{\ell-1}, t_{\ell}] \equiv$  Intervalo de Queima

Em cada um destes intervalos de queima, a distribuição de fluxo de nêutrons é considerada constante, ou seja, considerando o fluxo de nêutrons discretizado em grupos de energia teremos, para qualquer  $t$  dentro do intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_{\ell}]$

$$\Phi_g^n(t) \cong \Phi_g^n(t_{\ell-1}) \quad (2.22)$$

Assim, para cada início de intervalo de queima o fluxo de nêutrons é calculado através da equação de difusão de nêutrons estacionária, com os parâmetros nucleares mantidos constantes durante o intervalo  $[t_{\ell-1}, t_{\ell}]$ .

Uma vez que o fluxo de nêutrons é mantido constante dentro do intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_{\ell}]$ , a matriz de evolução da equação (2.20) torna-se uma matriz estacionária para o intervalo de tempo considerado. Assim, podemos reescrever a equação (2.20) como:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{N}^n(t) = \mathbf{E}_{\ell}^n \mathbf{N}^n(t), \quad t_{\ell-1} \leq t < t_{\ell} \quad (2.23)$$

onde  $\ell$  representa o intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_{\ell}]$  e  $\mathbf{E}_{\ell}^n = [h_{ij}^n(t_{\ell-1})]$  é a matriz de evolução estacionária.



# Capítulo 3

## Alguns Métodos de Solução

### 3.1 Introdução

Apesar de existir na literatura diversos métodos de solução das equações de depleção [2], [6–14], nos concentraremos em analisar alguns métodos que possuem relação direta com a presente dissertação. O primeiro método, proposto inicialmente por Bateman [2], baseia-se na resolução das equações de depleção de forma analítica. Os outros dois métodos, da decomposição [6] e de polinômios ortogonais [15],[16], baseiam-se na aproximação da exponencial da matriz de evolução.

### 3.2 Equações de Bateman

Considere uma cadeia linear onde os seus elementos relacionam-se da seguinte forma:

$$N_1 \xrightarrow{\lambda_1} N_2 \xrightarrow{\lambda_2} N_3 \xrightarrow{\lambda_3} \cdots N_{n-1} \xrightarrow{\lambda_{n-1}} N_n \xrightarrow{\lambda_n} \quad (3.1)$$

onde  $\lambda_n$  é a constante de decaimento do  $n$ -ésimo elemento da cadeia. Se o fluxo de

nêutrons for considerado, as equações tomam a seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dN_1}{dt} = -A_1N_1 \\ \frac{dN_2}{dt} = \lambda_1N_1 - A_2N_2 \\ \frac{dN_3}{dt} = \lambda_2N_2 - A_3N_3 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{dN_n}{dt} = \lambda_{n-1}N_{n-1} - A_nN_n \end{array} \right. \quad (3.2)$$

onde  $A_i = \lambda_i + \phi_i\sigma_i$  .

Através do sistema de equações dado por (3.2), podemos resolver o sistema de equações composto pelos primeiros nuclídeos e depois utilizarmos o argumento de indução matemática para encontrarmos a expressão para as concentrações isotópicas do enésimo elemento da cadeia:

$$N_n(t) = N_1^0 \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i \sum_{k=1}^n \beta_k e^{-A_k t} \quad (n > 1), \quad (3.3)$$

onde

$$\beta_k = \prod_{j \neq k} (A_j - A_k)^{-1} \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3.4)$$

e  $N_1^0$  é a concentração inicial do primeiro nuclídeo da cadeia. O conjunto de equações dada por (3.3) são chamadas de equações de Bateman. Note que estas equações de Bateman baseiam-se na análise de uma cadeia linear de actínídeos, ou seja, ela não permite cadeias onde ocorram reações de realimentação entre os seus elementos. Uma dedução mais formal utilizando análise complexa pode ser achada na referência [9].

### 3.3 Matriz Exponencial

Uma das formas mais utilizadas, para se calcularem as equações de depleção consiste no cálculo da matriz exponencial. Como vimos pela equação (2.23), podemos escrever o sistema de equações governando as concentrações dos actinídeos de maneira matricial da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{N}(t) = \mathbf{E}\mathbf{N}(t) \quad (3.5)$$

Nesta equação, suprimimos os índices  $n$  e  $\ell$  referentes ao nodo e intervalo de queima, respectivamente, por simplicidade.

Considerando que no instante inicial do intervalo, onde a matriz de evolução é considerada constante, tenhamos como condição inicial  $\mathbf{N}(\mathbf{t} = \mathbf{0}) = \mathbf{N}_0$ , o sistema de equações dado por 3.5 possui solução formal dada por:

$$\mathbf{N}(t) = \mathbf{A}(t)\mathbf{N}_0 \quad (3.6)$$

onde

$$\mathbf{A}(t) = e^{\mathbf{E}t} \quad (3.7)$$

é chamada matriz exponencial.

#### 3.3.1 Métodos de decomposição de matriz

Um dos métodos onde o cálculo da matriz exponencial é feito de maneira mais eficiente para problemas envolvendo grandes matrizes, são aqueles baseados na decomposição da matriz. Suponha que queiramos decompor a matriz de evolução  $\mathbf{E}$ . Todos os métodos de decomposição baseiam-se na seguinte transformação:

$$\mathbf{E} = \mathbf{C}\mathbf{D}\mathbf{C}^{-1} \quad (3.8)$$

O método consiste em descobrirmos qual matriz  $\mathbf{C}$  torna o cálculo de  $e^{t\mathbf{D}}$  mais simples de ser efetuado, já que a definição formal de  $e^{\mathbf{E}t}$  através de uma série de potência,

$$e^{\mathbf{E}t} = \mathbf{I} + \mathbf{E}t + \frac{\mathbf{E}^2 t^2}{2!} \quad (3.9)$$

nos permite escrever (3.8) como:

$$e^{\mathbf{E}t} = \mathbf{C}e^{\mathbf{D}t}\mathbf{C}^{-1} \quad (3.10)$$

Existem inúmeros métodos de decomposição [6], mas no presente trabalho descreveremos brevemente o método que faz uso de autovalores e autovetores. Neste método, a matriz  $\mathbf{C}$  é considerada como sendo dada pela seguinte forma:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mm} \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

onde

$$\mathbf{A}_k = \begin{bmatrix} a_{1k} \\ a_{2k} \\ a_{3k} \\ \vdots \\ a_{mk} \end{bmatrix} \quad k = 1, m \quad (3.12)$$

são os autovetores da matriz  $\mathbf{E}$  e satisfazem a seguinte equação de autovalor:

$$\mathbf{E}\mathbf{A}_k = \lambda_k \mathbf{A}_k \quad , \quad k = 1, m \quad (3.13)$$

O sistema de equações (3.13) pode ser reescrito matricialmente como:

$$\begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & \dots & h_{1m} \\ h_{21} & h_{22} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{m1} & h_{m2} & \dots & h_{mm} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mm} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mm} \end{bmatrix}$$

ou seja:

$$\mathbf{E}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{\Lambda} \quad (3.14)$$

ou ainda

$$\mathbf{E} = \mathbf{A}\mathbf{\Lambda}\mathbf{A}^{-1} \quad (3.15)$$

sendo a matriz  $\mathbf{\Lambda}$  a matriz diagonal onde seus elementos diagonais são os próprios autovalores de  $\mathbf{E}$ . Pela propriedade acima comentada, podemos escrever a equação (3.15) como:

$$e^{t\mathbf{E}} = \mathbf{A}e^{t\mathbf{\Lambda}}\mathbf{A}^{-1} \quad (3.16)$$

Assim, o cálculo da exponencial da matriz  $\mathbf{\Lambda}$ , necessária para a equação (3.10) torna-se relativamente simples:

$$e^{\mathbf{\Lambda}t} = \begin{bmatrix} e^{\lambda_1 t} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{\lambda_2 t} & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{\lambda_m t} \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

Comparando (3.15) e (3.10) percebemos que  $\mathbf{D} = \mathbf{\Lambda}$ , ou seja, a matriz que torna o cálculo da exponencial de  $\mathbf{E}$  é a própria matriz constituída pelos seus autovetores. Assim, a equação (3.10) torna-se:

$$e^{\mathbf{E}t} = \mathbf{A}e^{\mathbf{\Lambda}t}\mathbf{A}^{-1} \quad (3.18)$$

### 3.3.2 Potenciação e polinômios ortogonais

O método descrito aqui pode ser encontrado na referência [16]. Neste método, a matriz exponencial é obtida através da resolução do seguinte sistema de equações lineares

$$FA(t) = G \quad (3.19)$$

onde

$$F = \sum_{k=0}^{n+2} (-1)^{n-k} (n-k+3)! (\gamma_{n-k} + 2\gamma_{n-k+1} + \gamma_{n-k+2}) (Et)^k \quad (3.20)$$

e

$$G = \sum_{k=0}^{n+3} (\alpha_k + \beta_{k-1} + \alpha_{k-1}) (Et)^k \quad (3.21)$$

sendo os coeficientes alfas e betas dados por:

$$\beta_j = \sum_{l=0}^j \frac{\beta_{l-1}}{(l+1)!} \quad (3.22)$$

e

$$\alpha_{n+2-j} = (j+1)!(-1)^j (\gamma_{j-2} + 2\gamma_{j-1} + \gamma_j) \quad (3.23)$$

para  $i = 1, 2, \dots, n$ . Os coeficientes  $\gamma$ 's que aparecem em (3.20) e (3.23) são os coeficientes do polinômio de Jacobi de ordem  $n$ . Estes polinômios podem ser obtidos diretamente da propriedade de ortogonalidade, no entanto tal procedimento é muito trabalhoso, pouco eficiente e de difícil programação. Uma maneira mais simples de obtermos os coeficientes dos polinômios de Jacobi é através da seguinte expressão

recursiva:

$$\gamma_l^n = \frac{(n+1-l)(n+l+\theta+\delta)}{l(l+\delta)} \quad (3.24)$$

para  $l = 1, 2, \dots, n$ , com  $\theta = 2$ ,  $\delta = 1$  e  $\gamma_0^n \equiv 1, \forall n \geq 0$ . De posse destes coeficientes, o sistema de equações dado por 3.20 pode ser calculado por qualquer método de resolução de equações lineares; por exemplo, eliminação Gaussiana.

Convém lembrar que todos os métodos de cálculo que baseiam-se na resolução das equações de depleção isotópicas utilizando a matriz exponencial, requerem um tempo computacional elevado para a obtenção das soluções.

# Capítulo 4

## Método Proposto

### 4.1 Introdução

Um dos maiores desafios encontrados na Física de Reatores consiste na análise das cadeias de depleção dos actínídeos, dentro do núcleo do reator, em virtude de sua enorme importância para a operação do reator. A procura da otimização do núcleo passa pela busca em minimizar os tempos de cálculos, já que as rotinas computacionais que tratam o problema consomem a maior parte do tempo total gasto pelos códigos de simulação neutrônicos.

Neste capítulo, as equações de depleção serão resolvidas para uma cadeia de actínídeos fechada, onde na parte inicial, serão permitidas reações de realimentação ( $n, 2n$ ). Nesta parte da cadeia as concentrações isotópicas serão calculadas utilizando o método da decomposição para desacoplar as equações, enquanto no restante da cadeia as concentrações serão calculadas utilizando soluções analíticas.

Além disso, serão analisados os produtos de fissão decorrentes da queima do combustível. Suas equações, que dependem das concentrações dos actínídeos, serão desacopladas por meio da utilização de médias no tempo das concentrações dos actínídeos, calculadas em cada nodo.



## 4.2 Cadeias de depleção

### 4.2.1 Cadeia de depleção dos actinídeos

A cadeia de nuclídeos que será utilizada nesta dissertação é mostrada na figura 4.1. Note que esta cadeia trata das realimentações que ocorrem entre os três primeiros actinídeos. A realimentação vem por meio de reações (n,2n) e mostra-se importante em virtude do fato de mudar, de forma considerável, a concentração de boro necessária para tornar o reator crítico. No caso de cadeias desacopladas a matriz de evolução (2.23) torna-se trivial em virtude de ser triangular inferior.

As caixas vazias nesta cadeia, significam nuclídeos que por possuírem um tempo de meia-vida tão pequeno podem ser despeçados sem alterarem significativamente as concentrações finais.

Outro fato importante, consiste em que esta cadeia é pequena por se tratar de um cálculo de produção e portanto podemos trabalhar com essa cadeia simplificada, já que estamos considerando apenas os nuclídeos que contribuem de maneira mais significativa para o controle do reator. Coisa distinta se verificaria se tivéssemos que considerar o inventário do reator, onde há a necessidade de conhecermos todos os elementos presentes no combustível após a sua retirada do núcleo.

Nesta cadeia os elementos serão ordenados da seguinte maneira:

1	$^{234}U$	<i>Urânio</i>	7	$^{239}Np$	<i>Netúnio</i>	13	$^{242}Am$	<i>Americío</i>
2	$^{235}U$	<i>Urânio</i>	8	$^{239}Pu$	<i>Plutônio</i>	14	$^{242}Pu$	<i>Plutônio</i>
3	$^{236}U$	<i>Urânio</i>	9	$^{240}Pu$	<i>Plutônio</i>	15	$^{243}Am$	<i>Americío</i>
4	$^{238}U$	<i>Urânio</i>	10	$^{241}Pu$	<i>Plutônio</i>	16	$^{242}Cm$	<i>Cúrio</i>
5	$^{237}Np$	<i>Netúnio</i>	11	$^{241}Am$	<i>Americío</i>	17	$^{244}Cm$	<i>Cúrio</i>
6	$^{238}Pu$	<i>Plutônio</i>	12	$^{242m}Am$	<i>Americío</i>			

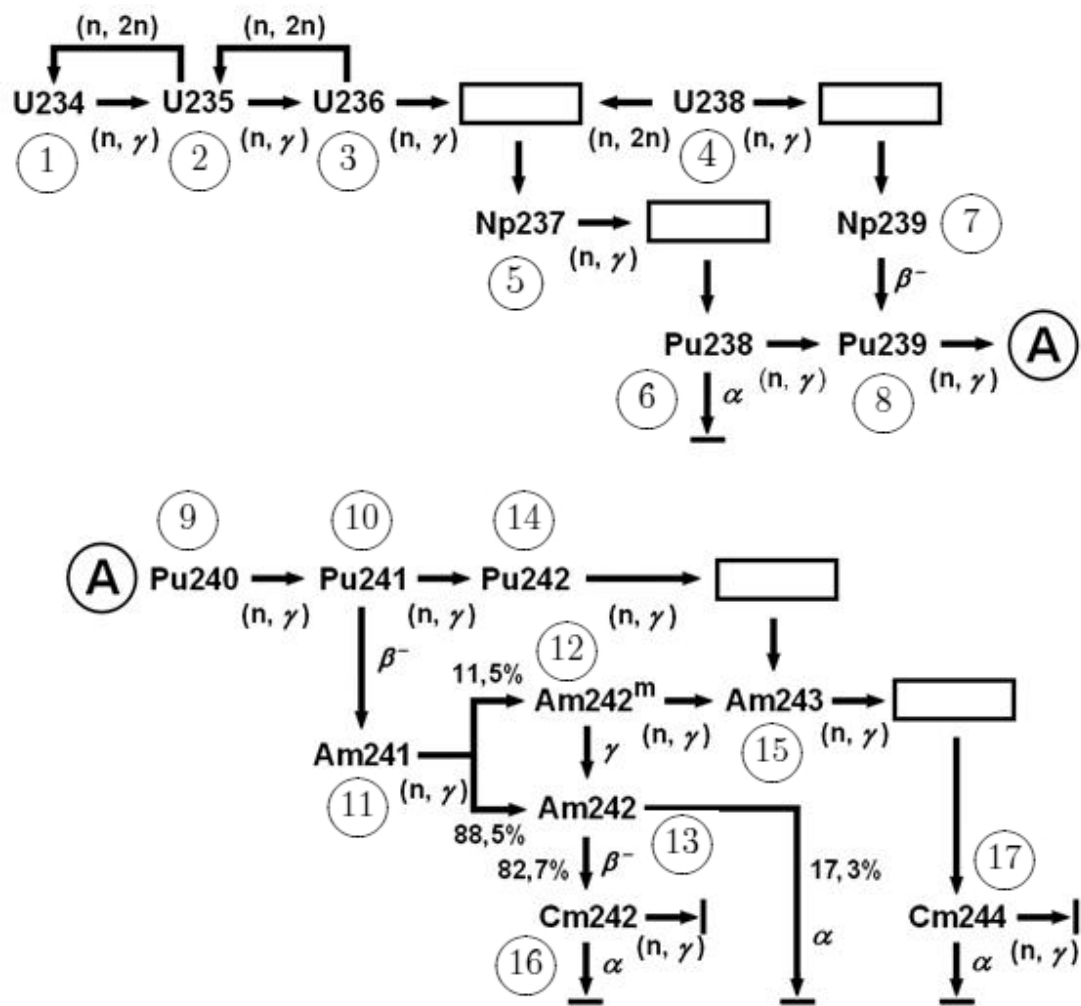


Figura 4.1: Cadeia de Actínídeos utilizada nesta dissertação

## 4.2.2 Cadeias de depleção dos produtos de fissão

As cadeias dos produtos de fissão que serão utilizadas nesta dissertação são mostradas nas figuras 4.2 a 4.9

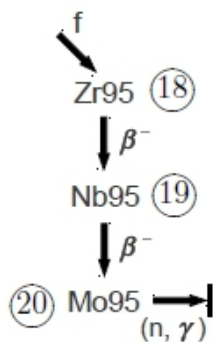


Figura 4.2: *Cadeia do Molibdênio-95*

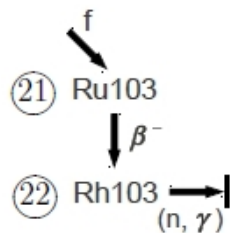


Figura 4.3: *Cadeia do Ródio-103*

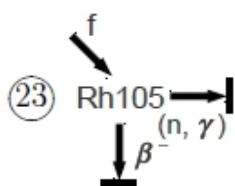


Figura 4.4: *Cadeia do Ródio-105*

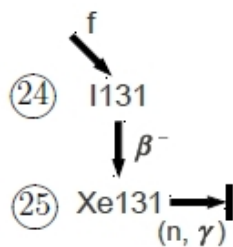


Figura 4.5: *Cadeia do Xenônio-131*

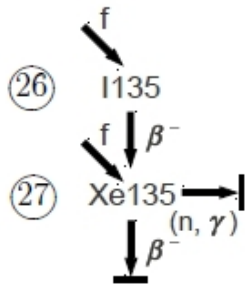


Figura 4.6: *Cadeia do Xenônio-135*

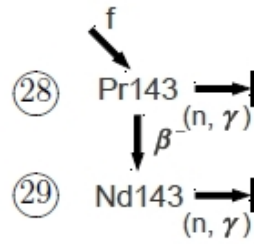


Figura 4.7: *Cadeia do Praseodímio-143*

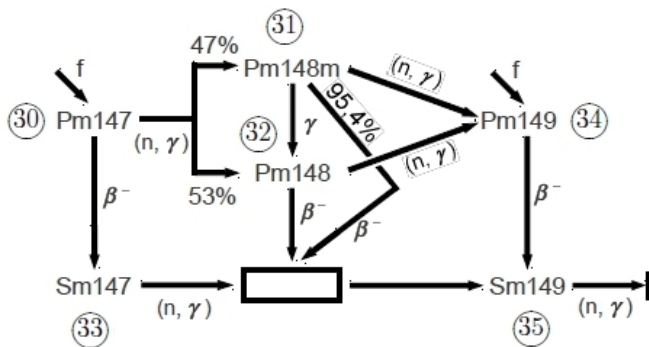


Figura 4.8: *Cadeia do Samário-149*

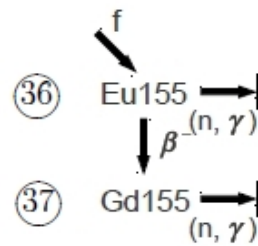


Figura 4.9: *Cadeia do Gadolínio-155*

Nestas cadeias os núclídeos serão ordenados, dando prosseguimento à numeração estabelecida para os actínídeos, da seguinte maneira:

18	$^{95}\text{Zr}$	<i>Zircônio</i>	25	$^{131}\text{Xe}$	<i>Xenônio</i>	32	$^{148}\text{Pm}$	<i>Promécio</i>
19	$^{95}\text{Nb}$	<i>Nióbio</i>	26	$^{135}\text{I}$	<i>Iodo</i>	33	$^{147}\text{Sm}$	<i>Samário</i>
20	$^{95}\text{Mo}$	<i>Molibdênio</i>	27	$^{135}\text{Xe}$	<i>Xenônio</i>	34	$^{149}\text{Pm}$	<i>Promécio</i>
21	$^{103}\text{Ru}$	<i>Rutênio</i>	28	$^{143}\text{Pr}$	<i>Praseodímio</i>	35	$^{149}\text{Sm}$	<i>Samário</i>
22	$^{103}\text{Rh}$	<i>Ródio</i>	29	$^{143}\text{Nd}$	<i>Neodímio</i>	36	$^{155}\text{Eu}$	<i>Európio</i>
23	$^{105}\text{Rh}$	<i>Ródio</i>	30	$^{147}\text{Pm}$	<i>Promécio</i>	37	$^{155}\text{Gd}$	<i>Gadolínio</i>
24	$^{131}\text{I}$	<i>Iodo</i>	31	$^{148m}\text{Pm}$	<i>Promécio</i>			

Na próxima seção são apresentadas as equações que governam as concentrações isotópicas dos núclídeos envolvidos tanto na cadeia dos actinídeos quanto nas cadeias de produtos de fissão.

## 4.3 Equações de depleção

### 4.3.1 Equações de depleção dos actinídeos

Como vimos, as concentrações dos vários isótopos presentes em um reator podem ser descritas como um conjunto de equações de produção-destruição que dependem umas das outras, conforme a equação (2.19). Os índices inferiores que usaremos representam a ordem do núclídeo dentro da cadeia. As equações de depleção dos 17 elementos representados na figura (4.1), descrevendo as concentrações isotópicas para o intervalo  $[t_{\ell-1}, t_{\ell}]$ , são dadas por:

$$\frac{d}{dt}N_1^n(t) = -h_{11}^n N_1^n(t) + h_{12}^n N_2^n(t) \quad (4.1)$$

$$\frac{d}{dt}N_2^n(t) = h_{21}^n N_1^n(t) - h_{22}^n N_2^n(t) + h_{23}^n N_3^n(t) \quad (4.2)$$

$$\frac{d}{dt}N_3^n(t) = h_{32}^n N_2^n(t) - h_{33}^n N_3^n(t) \quad (4.3)$$

$$\frac{d}{dt}N_4^n(t) = -h_{44}^n N_4^n(t) \quad (4.4)$$

$$\frac{d}{dt}N_5^n(t) = h_{53}^n N_3^n(t) + h_{54}^n N_4^n(t) - h_{55}^n N_5^n(t) \quad (4.5)$$

$$\frac{d}{dt}N_6^n(t) = h_{65}^n N_5^n(t) - h_{66}^n N_6^n(t) \quad (4.6)$$

$$\frac{d}{dt}N_7^n(t) = h_{74}^n N_4^n(t) - h_{77}^n N_7^n(t) \quad (4.7)$$

$$\frac{d}{dt}N_8^n(t) = h_{86}^n N_6^n(t) + h_{87}^n N_7^n(t) - h_{88}^n N_8^n(t) \quad (4.8)$$

$$\frac{d}{dt}N_9^n(t) = h_{98}^n N_8^n(t) - h_{99}^n N_9^n(t) \quad (4.9)$$

$$\frac{d}{dt}N_{10}^n(t) = h_{109}^n N_9^n(t) - h_{1010}^n N_{10}^n(t) \quad (4.10)$$

$$\frac{d}{dt}N_{11}^n(t) = h_{1110}^n N_{10}^n(t) - h_{1111}^n N_{11}^n(t) \quad (4.11)$$

$$\frac{d}{dt}N_{12}^n(t) = h_{1211}^n N_{11}^n(t) - h_{1212}^n N_{12}^n(t) \quad (4.12)$$

$$\frac{d}{dt}N_{13}^n(t) = h_{1311}^n N_{11}^n(t) + h_{1312}^n N_{12}^n(t) - h_{1313}^n N_{13}^n(t) \quad (4.13)$$

$$\frac{d}{dt}N_{14}^n(t) = h_{1410}^n N_{10}^n(t) - h_{1414}^n N_{14}^n(t) \quad (4.14)$$

$$\frac{d}{dt}N_{15}^n(t) = h_{1512}^n N_{12}^n(t) + h_{1514}^n N_{14}^n(t) - h_{1515}^n N_{15}^n(t) \quad (4.15)$$

$$\frac{d}{dt}N_{16}^n(t) = h_{1613}^n N_{13}^n(t) - h_{1616}^n N_{16}^n(t) \quad (4.16)$$

$$\frac{d}{dt}N_{17}^n(t) = h_{1715}^n N_{15}^n(t) - h_{1717}^n N_{17}^n(t) \quad (4.17)$$

ou de forma matricial:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{N}^n(t) = \mathbf{E}_\ell^n \mathbf{N}^n(t) \quad (4.18)$$

onde:

$$\mathbf{N}^n(t) \equiv \begin{bmatrix} N_1^n(t) \\ N_2^n(t) \\ N_3^n(t) \\ \vdots \\ N_{17}^n(t) \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

e





pela equação (2.4.2). A forma explícita de cada um destes coeficientes, encontra-se no apêndice. Note que, a não ser por dois elementos dessa matriz, teríamos uma matriz triangular inferior, ou seja um sistema de equações relativamente simples de ser resolvido. A parte crucial do nosso trabalho consiste em justamente desacoplar as equações que possuem realimentação daquelas que não possuem realimentação no restante da cadeia, possibilitando, assim, um tratamento analítico para as equações sem realimentação.

### 4.3.2 Equações de depleção dos produtos de fissão

Da mesma forma como fizemos com as equações de depleção caracterizando os actínídeos, podemos fazer algumas simplificações na equação que descreve as mudanças nas concentrações dos produtos de fissão, representado pela equação (2.6). Assim, utilizando a formulação de multigrupos e métodos nodais, a equação (2.6) torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}N_i^n(t) &= \sum_{j=1}^{I_f} \Gamma_j^i N_j^n(t) \sum_{g=1}^G \sigma_{fg}^j \bar{\Phi}_g^n(t) + \lambda_{i-1} N_{i-1}^n(t) \\ &\quad - \left( \lambda_i + \sum_{g=1}^G \sigma_{ag}^i \bar{\Phi}_g^n(t) \right) N_i^n(t) \quad ; \quad i = I_{f+1}, I_{\text{total}} \end{aligned} \quad (4.20)$$

Podemos generalizar a equação (4.20) para abranger qualquer um dos produtos de fissão que estejamos considerando, representados nas figuras 4.2 a 4.9. Considerando que haja um total de  $I_{\text{total}}$  núclídeos (actínídeos mais produtos de fissão), as equações para estes produtos de fissão são dadas por:

$$\frac{d}{dt}N_k^n(t) = \sum_{j=I_f+1}^{I_{\text{total}}} \varepsilon_{ij}^n N_j^n(t) + s_k^n \quad k = I_f + 1, \dots, I_{\text{total}} \quad (4.21)$$

onde

$$s_k^n \equiv \sum_{i=1}^{I_f} s_{ki}^n = \sum_{i=1}^{I_f} \Gamma_i^k \sum_{g=1}^G \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n(t) N_i^n(t) \quad (4.22)$$

e

$$\varepsilon_{ij}^n = \begin{cases} -\left(\lambda_i + \sum_{g=1}^G \sigma_{ag}^i \bar{\Phi}_g^n(t)\right) & \text{para } j = k \\ \Upsilon_{ij} \lambda_{ij} & \text{e/ou } \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^i \bar{\Phi}_g^n(t) \text{ para } j \neq k \end{cases}$$

Nestas equações,  $\Gamma_i^k$  representa o percentual da fissão do actínídeo i que dá origem ao produto de fissão k. Por meio da equação (4.21), vamos escrever as equações de depleção caracterizando os produtos de fissão apresentados na seção anterior.

### ***Cadeia do Mo95***

$$\frac{d}{dt} N_{18}^n(t) = -\varepsilon_{18,18}^n N_{18}^n(t) + S_{18}^n \quad (4.23)$$

$$\frac{d}{dt} N_{19}^n(t) = \varepsilon_{19,18}^n N_{18}^n(t) - \varepsilon_{19,19}^n N_{19}^n(t) \quad (4.24)$$

$$\frac{d}{dt} N_{20}^n(t) = \varepsilon_{20,19}^n N_{19}^n(t) - \varepsilon_{20,20}^n N_{20}^n(t) \quad (4.25)$$

### ***Cadeia do Rh103***

$$\frac{d}{dt} N_{21}^n(t) = -\varepsilon_{21,21}^n N_{21}^n(t) + S_{21}^n \quad (4.26)$$

$$\frac{d}{dt} N_{22}^n(t) = \varepsilon_{22,21}^n N_{21}^n(t) - \varepsilon_{22,22}^n N_{22}^n(t) \quad (4.27)$$

$$(4.28)$$

### ***Cadeia do Rh105***

$$\frac{d}{dt} N_{23}^n(t) = -\varepsilon_{23,23}^n N_{23}^n(t) + S_{23}^n \quad (4.29)$$

### *Cadeia do Xe131*

$$\frac{d}{dt}N_{24}^n(t) = -\varepsilon_{24,24}^n N_{24}^n(t) + S_{24}^n \quad (4.30)$$

$$\frac{d}{dt}N_{25}^n(t) = \varepsilon_{25,24}^n N_{24}^n(t) - \varepsilon_{25,25}^n N_{25}^n(t) \quad (4.31)$$

$$(4.32)$$

### *Cadeia do Xe135*

$$\frac{d}{dt}N_{26}^n(t) = -\varepsilon_{26,26}^n N_{26}^n(t) + S_{26}^n \quad (4.33)$$

$$\frac{d}{dt}N_{27}^n(t) = \varepsilon_{27,26}^n N_{26}^n(t) - \varepsilon_{27,27}^n N_{27}^n(t) + S_{27}^n \quad (4.34)$$

### *Cadeia do Pr143*

$$\frac{d}{dt}N_{28}^n(t) = -\varepsilon_{28,28}^n N_{28}^n(t) + S_{28}^n \quad (4.35)$$

$$\frac{d}{dt}N_{29}^n(t) = \varepsilon_{29,28}^n N_{28}^n(t) - \varepsilon_{29,29}^n N_{29}^n(t) \quad (4.36)$$

### *Cadeia do Sm149*

$$\frac{d}{dt}N_{30}^n(t) = -\varepsilon_{30,30}^n N_{30}^n(t) + S_{30}^n \quad (4.37)$$

$$\frac{d}{dt}N_{31}^n(t) = \varepsilon_{31,30}^n N_{30}^n(t) - \varepsilon_{31,31}^n N_{31}^n(t) \quad (4.38)$$

$$\frac{d}{dt}N_{32}^n(t) = \varepsilon_{32,31}^n N_{31}^n(t) - \varepsilon_{32,32}^n N_{32}^n(t) \quad (4.39)$$

$$\frac{d}{dt}N_{33}^n(t) = \varepsilon_{33,30}^n N_{30}^n(t) - \varepsilon_{33,33}^n N_{33}^n(t) \quad (4.40)$$

$$\frac{d}{dt}N_{34}^n(t) = \varepsilon_{34,31}^n N_{31}^n(t) + \varepsilon_{34,32}^n N_{32}^n(t) - \varepsilon_{34,34}^n N_{34}^n(t) + S_{34}^n \quad (4.41)$$

$$\frac{d}{dt}N_{35}^n(t) = \varepsilon_{35,31}^n N_{31}^n(t) + \varepsilon_{35,32}^n N_{32}^n(t) + \varepsilon_{35,33}^n N_{33}^n(t) + \varepsilon_{35,34}^n N_{34}^n(t) - \varepsilon_{35,35}^n N_{35}^n(t) \quad (4.42)$$

### *Cadeia do Gd155*

$$\frac{d}{dt}N_{36}^n(t) = -\varepsilon_{36,36}^n N_{36}^n(t) + S_{36}^n \quad (4.43)$$

$$\frac{d}{dt}N_{37}^n(t) = \varepsilon_{37,36}^n N_{36}^n(t) - \varepsilon_{37,37}^n N_{37}^n(t) \quad (4.44)$$

## 4.4 Método da Decomposição

A equação que descreve as concentrações isotópicas do sistema formado apenas pelos três primeiros actínídeos da cadeia mostrada na figura 4.1 é dada por:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{N}^n(t) = \hat{\mathbf{E}}_t^n \mathbf{N}^n(t) \quad (4.45)$$

onde:

$$\mathbf{N}^n(t) = \begin{bmatrix} N_1^n(t) \\ N_2^n(t) \\ N_3^n(t) \end{bmatrix} \quad (4.46)$$

e, a matriz de evolução deste sistema, dada por

$$\widehat{\mathbf{E}}_\ell^n = \begin{bmatrix} h_{11}^n & h_{12}^n & 0 \\ h_{21}^n & h_{22}^n & h_{23}^n \\ 0 & h_{32}^n & h_{33}^n \end{bmatrix} \quad (4.47)$$

Podemos relacionar o vetor das concentrações isotópicas com um vetor  $\xi^n(t)$ , tal que

$$\mathbf{N}^n(t) = Q_n \xi^n(t) \quad (4.48)$$

e da equação (4.45) seguindo que

$$\frac{d\xi^n(t)}{dt} = (Q_n^{-1} \widehat{\mathbf{E}}_\ell^n Q_n) \xi^n(t) \quad (4.49)$$

onde a matriz  $Q_n$ , cujas colunas são formadas pelos autovetores associados aos autovalores  $\lambda_k^n$ , para  $k = 1, 2$  e  $3$ , da matriz  $\widehat{\mathbf{E}}_\ell^n$ , diagonaliza a matriz  $\widehat{\mathbf{E}}_\ell^n$ , ou seja,

$$Q_n^{-1} \widehat{\mathbf{E}}_\ell^n Q_n = \begin{bmatrix} \lambda_1^n & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2^n & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^n \end{bmatrix} \quad (4.50)$$

Então, das equações (4.49) e (4.50) segue que

$$\frac{d\xi_k^n(t)}{dt} = \lambda_k^n \xi_k^n(t) \quad (4.51)$$

para  $k = 1, 2$  e  $3$ . A solução da equação (4.51), para  $t_{\ell-1} \leq t \leq t_\ell$ , é da seguinte forma:

$$\xi_k^n(t) = \xi_k^n(t_{\ell-1}) \exp[\lambda_k^n(t - t_{\ell-1})] \quad (4.52)$$

Usando a equação (4.48), obtemos, para  $N^n(t_{\ell-1})$  conhecido, que

$$\xi^n(t_{\ell-1}) = Q_n^{-1} N^n(t_{\ell-1}) \quad (4.53)$$

Agora, definindo

$$Q_n \equiv \begin{bmatrix} q_{11}^n & q_{12}^n & q_{13}^n \\ q_{21}^n & q_{22}^n & q_{23}^n \\ q_{31}^n & q_{32}^n & q_{33}^n \end{bmatrix} \quad (4.54)$$

e

$$Q_n^{-1} \equiv \begin{bmatrix} p_{11}^n & p_{12}^n & p_{13}^n \\ p_{21}^n & p_{22}^n & p_{23}^n \\ p_{31}^n & p_{32}^n & p_{33}^n \end{bmatrix} \quad (4.55)$$

podemos escrever:

$$N_i^n(t) = \sum_{j=1}^3 q_{ij}^n \xi_j^n(t) \quad (4.56)$$

e

$$\xi_j^n(t_{\ell-1}) = \sum_{k=1}^3 p_{jk}^n N_k^n(t_{\ell-1}) \quad (4.57)$$

Com isso, usando as equações (4.52), (4.56) e (4.57) obtemos

$$N_i^n(t) = \sum_{j=1}^3 a_{ij}^n \exp[\lambda_j^n(t - t_{\ell-1})] \quad (4.58)$$

onde

$$a_{ij}^n = q_{ij}^n \sum_{k=1}^3 p_{jk}^n N_k^n(t_{\ell-1}) \quad (4.59)$$

## 4.5 Soluções Analíticas

Nesta seção, iremos apenas apresentar as soluções analíticas referentes aos actínidos e aos produtos de fissão, assim como os respectivos coeficientes que aparecem em suas expressões.

### 4.5.1 Soluções analíticas dos Actinídeos

A solução geral para os demais núclídeos da cadeia pode ser escrita como:

$$N_i^n(t) = \sum_{j=1}^i a_{ij}^n e^{\beta_j^n(t-t_{\ell-1})} \quad (4.60)$$

onde:

$$\beta_j^n = \begin{cases} \lambda_j^n & \text{para } j \leq 3 \\ h_{jj}^n & \text{para } j \geq 4 \end{cases}$$

e os coeficientes a's que aparecem nesta equação dependem do núclídeo que esteja sendo considerado. Vamos explicitá-los:

***Urânio 238***

$$a_{4j} = \begin{cases} 0 & \text{para } j \leq 3 \\ N_4^n(t_{\ell-1}) & \text{para } j=4 \end{cases}$$

***Netúnio 237***

$$a_{5j} = \begin{cases} a_{5j}^n \equiv \frac{h_{53}^n a_{3j}^n + h_{54}^n a_{44}^n}{\beta_j^n - h_{55}^n} & \text{para } j \leq 4 \\ a_{55}^n \equiv N_5^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^4 a_{5j}^n & \text{para } j=5 \end{cases}$$

**Plutônio 238**

$$a_{6j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{65}^n a_{5j}^n}{\beta_j^n - h_{66}^n} & \text{para } j \leq 5 \\ N_6^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^5 a_{6j}^n & \text{para } j=6 \end{cases}$$

**Netúnio 239**

$$a_{7j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{74}^n N_4^n(t_{\ell-1})}{\beta_4^n - \beta_7^n} & \text{para } j = 4 \\ N_7^n(t_{\ell-1}) - a_{74}^n & \text{para } j=7 \end{cases}$$

onde:  $a_{71}^n = a_{72}^n = a_{73}^n = a_{75}^n = a_{76}^n = 0$

**Plutônio 239**

$$a_{8j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{86}^n a_{6j}^n + h_{87}^n a_{7j}^n}{\beta_j^n - h_{88}^n} & \text{para } j \leq 7 \\ N_8^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^7 a_{8j}^n & \text{para } j=8 \end{cases}$$

onde  $a_{67}^n = 0$ .

**Plutônio 240**

$$a_{9j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{98}^n a_{8j}^n}{\beta_j^n - h_{99}^n} & \text{para } j \leq 8 \\ N_9^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^8 a_{9j}^n & \text{para } j=9 \end{cases}$$



*Plutônio 241*

$$a_{10j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{109}^n a_{9j}^n}{\beta_j^n - h_{1010}^n} & \text{para } j \leq 9 \\ N_{10}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^9 a_{10j}^n & \text{para } j=10 \end{cases}$$

*Americío 241*

$$a_{11j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{1110}^n a_{10j}^n}{\beta_j^n - h_{1111}^n} & \text{para } j \leq 10 \\ N_{11}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{10} a_{11j}^n & \text{para } j=11 \end{cases}$$

*Americío 242-meta estável*

$$a_{12j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{1211}^n a_{11j}^n}{\beta_j^n - h_{1212}^n} & \text{para } j \leq 11 \\ N_{12}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{11} a_{12j}^n & \text{para } j=12 \end{cases}$$

**Americio 242**

$$a_{13j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{1311}^n a_{11j}^n + h_{1312}^n a_{12j}^n}{\beta_j^n - h_{1313}^n} & \text{para } j \leq 12 \\ N_{13}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{12} a_{13j}^n & \text{para } j=13 \end{cases}$$

onde  $a_{1112}^n = 0$ .

**Plutônio 242**

$$a_{14j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{1410}^n a_{10j}^n}{\beta_j^n - h_{1414}^n} & \text{para } j \leq 13 \\ N_{14}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{13} a_{14j}^n & \text{para } j=14 \end{cases}$$

onde  $a_{1411}^n = a_{1412}^n = a_{1413}^n = 0$ .

**Americio 243**

$$a_{15j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{1512}^n a_{12j}^n + h_{1514}^n a_{14j}^n}{\beta_j^n - h_{1515}^n} & \text{para } j \leq 14 \\ N_{15}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{14} a_{15j}^n & \text{para } j=15 \end{cases}$$

onde  $a_{1213}^n = a_{1214}^n = 0$ .

### Cúrio 242

$$a_{16j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{1613}^n a_{13j}^n}{\beta_j^n - h_{1616}^n} & \text{para } j \leq 15 \\ N_{16}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{15} a_{16j}^n & \text{para } j=16 \end{cases}$$

onde  $a_{1614}^n = a_{1615}^n = 0$ .

### Cúrio 244

$$a_{17j} \equiv \begin{cases} \frac{h_{1715}^n a_{15j}^n}{\beta_j^n - h_{1717}^n} & \text{para } j \leq 16 \\ N_{17}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{16} a_{17j}^n & \text{para } j=17 \end{cases}$$

onde  $a_{1716}^n = 0$ .

## 4.5.2 Soluções analíticas dos Produtos de fissão

Para resolvermos a equação (4.21) precisamos conhecer o fluxo de nêutrons e também as concentrações dos nuclídeos fissionáveis, representados nesta equação por  $N_i^n(t)$ , que dão origem ao produto de fissão, em questão. O fluxo de nêutrons será obtido, através da resolução da equação de difusão estacionária, considerando intervalos de queimas, onde o fluxo é mantido constante. Já as concentrações dos actinídeos necessárias para resolvermos a equação (4.20) serão aproximadas pela seguinte expressão:

$$\bar{N}_{i,\ell}^n \equiv \frac{1}{\Delta t_\ell} \int_{t_{\ell-1}}^{t_\ell} N_i^n(t) dt \quad (4.61)$$

Assim, usando (4.61) em (4.22), o termo fonte será dado por:

$$s_k^n \equiv \sum_{i=1}^{I_f} \Gamma_i^k \bar{N}_{i,\ell}^n \sum_{g=1}^G \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad (4.62)$$

Sendo assim, ao fazermos esta aproximação para as concentrações isotópicas dos actinídeos, as equações para os produtos de fissão podem ser resolvidas analiticamente.

Ao analisarmos os produtos de fissão *Mo95*, *Rh103*, *Rh105*, *Xe131*, *Pr143* e *Gd155*, percebemos que as suas cadeias são análogas, apresentando somente um termo de fonte, e podem ser escritas da seguinte forma geral:

$$\frac{d}{dt} N_i^n(t) = \varepsilon_{i,i}^n N_i^n(t) + S_i \quad (4.63)$$

$$\frac{d}{dt} N_{i+1}^n(t) = \varepsilon_{i+1,i}^n N_i^n(t) + \varepsilon_{i+1,i+1}^n N_{i+1}^n(t) \quad (4.64)$$

$$\frac{d}{dt} N_{i+2}^n(t) = \varepsilon_{i+2,i+1}^n N_{i+1}^n(t) + \varepsilon_{i+2,i+2}^n N_{i+2}^n(t) \quad (4.65)$$

onde  $i = 18, 21, 23, 24, 28, 36$ . Além disso,  $N_{i+1}^n(t) = N_{i+2}^n(t) = 0$  para a cadeia do *Rh105*, enquanto que  $N_{i+2}^n(t) = 0$  para as cadeias do *Rh103*, *Xe131*, *Pr143* e do *Gd155*.

A solução para o produto de fissão  $i$  será dada por:

$$N_i^n(t) = a_{i,i}^n e^{\varepsilon_{i,i}^n (t-t_{\ell-1})} - S_i' \quad (4.66)$$

onde:

$$a_{i,i} \equiv \left[ N_i^n(t_{\ell-1}) + S_i' \right] \quad (4.67)$$

$$S'_i \equiv \frac{S_i}{\varepsilon_{i,i}^n} \quad (4.68)$$

A solução para o produto de fissão  $i+1$  será:

$$N_{i+1}^n(t) = \sum_{j=i}^{i+1} a_{i+1,j}^n e^{\varepsilon_{j,j}^n(t-t_{\ell-1})} - S'_{i+1} \quad (4.69)$$

onde:

$$a_{i+1,j}^n = \begin{cases} a_{j,j}^n \frac{\varepsilon_{i,j}^n}{(\varepsilon_{j,j}^n - \varepsilon_{i+1,i+1}^n)} & \text{para } j = i \\ N_j^n(t_{\ell-1}) - a_{j,i}^n - S'_j & \text{para } j=i+1 \end{cases}$$

$$S'_{i+1} = S'_i \frac{\varepsilon_{i+1,i}^n}{\varepsilon_{i+1,i+1}^n} \quad (4.70)$$

Enquanto a solução para  $i + 2$  será:

$$N_{i+2}^n(t) = \sum_{j=i}^{i+2} a_{i+2,j}^n e^{\varepsilon_{j,j}^n(t-t_{\ell-1})} - S'_{i+2} \quad (4.71)$$

onde:

$$a_{i+2,j}^n = \begin{cases} a_{i+1,j}^n \frac{\varepsilon_{i+2,i+1}^n}{(\varepsilon_{i+1,j}^n - \varepsilon_{i+2,i+2}^n)} & \text{para } j = i \\ N_j^n(t_{\ell-1}) \frac{\varepsilon_{i+2,j}^n}{(\varepsilon_{j,j}^n - \varepsilon_{i+2,i+2}^n)} - \frac{\varepsilon_{i+2,j}^n}{(\varepsilon_{j,i}^n - \varepsilon_{i+2,i+2}^n)} (a_{j,i}^n + S'_j) & \text{para } j = i + 1 \\ N_j^n(t_{\ell-1}) - N_{i+1}^n(t_{\ell-1}) \frac{\varepsilon_{j,i+1}^n}{(\varepsilon_{i+1,i+1}^n - \varepsilon_{j,j}^n)} - S'_{i+1} \frac{\varepsilon_{j,i+1}^n}{(\varepsilon_{i+1,i}^n - \varepsilon_{j,j}^n)} + S'_j & \text{para } j = i + 2 \end{cases}$$

Ao analisarmos a cadeia do  $^{135}\text{Xe}$  notamos que as equações que descrevem o comportamento temporal das concentrações isotópicas assemelham-se às equações das cadeias anteriores com a distinção de que apresentam um termo de fonte em seu segundo nuclídeo. De uma forma geral, as equações que descrevem estes dois produtos de fissão são dadas por:

$$\frac{d}{dt}N_i^n(t) = \varepsilon_{i,i}^n N_i^n(t) + S_i \quad (4.72)$$

$$\frac{d}{dt}N_{i+1}^n(t) = \varepsilon_{i+1,i}^n N_i^n(t) + \varepsilon_{i+1,i+1}^n N_{i+1}^n(t) + S_{i+1} \quad (4.73)$$

onde  $i = 26$ . A solução para o elemento  $i(I135)$  será igual à equação (4.66). Já a solução para o elemento  $i + 1(Xe135)$  será semelhante à equação (4.69), exceto pelo fato de possuir um termo adicional

$$N_{i+1}^n(t) = \sum_{j=i}^{i+1} a_{i+1,j}^n e^{\varepsilon_{j,j}^n(t-t_{\ell-1})} - S_{i+1}'' \quad (4.74)$$

onde

$$a_{i+1,j}^n = \begin{cases} a_{j,j}^n \frac{\varepsilon_{i,j}^n}{(\varepsilon_{j,j}^n - \varepsilon_{i+1,i+1}^n)} & \text{para } j = i \\ N_j^n(t_{\ell-1}) - a_{j,i}^n - S_j'' & \text{para } j=i+1 \end{cases}$$

$$S_{i+1}'' = S_{i+1}' + \frac{S_{i+1}}{\varepsilon_{i+1,i+1}} \quad (4.75)$$

Por fim, a cadeia do  $^{149}\text{Sm}$  é completamente diferente das demais, mas as equa-

ções desta cadeia também podem ser resolvidas analiticamente. As equações que governam as concentrações isotópicas na cadeia do  $^{149}\text{Sm}$  podem ser reescritas, de maneira genérica, como

$$\frac{d}{dt}N_i^n(t) = \varepsilon_{i,i}^n N_i^n(t) + S_i \quad (4.76)$$

$$\frac{d}{dt}N_{i+1}^n(t) = \varepsilon_{i+1,i}^n N_i^n(t) + \varepsilon_{i+1,i+1}^n N_{i+1}^n(t) \quad (4.77)$$

$$\frac{d}{dt}N_{i+2}^n(t) = \varepsilon_{i+2,i+1}^n N_{i+1}^n(t) + \varepsilon_{i+2,i+2}^n N_{i+2}^n(t) \quad (4.78)$$

$$\frac{d}{dt}N_{i+3}^n(t) = \varepsilon_{i+3,i}^n N_i^n(t) + \varepsilon_{i+3,i+3}^n N_{i+3}^n(t) \quad (4.79)$$

$$\frac{d}{dt}N_{i+4}^n(t) = \varepsilon_{i+4,i+1}^n N_{i+1}^n(t) + \varepsilon_{i+4,i+2}^n N_{i+2}^n(t) + \varepsilon_{i+4,i+4}^n N_{i+4}^n(t) + S_{i+4} \quad (4.80)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}N_{i+5}^n(t) &= \varepsilon_{i+5,i+1}^n N_{i+1}^n(t) + \varepsilon_{i+5,i+2}^n N_{i+2}^n(t) + \varepsilon_{i+5,i+3}^n N_{i+3}^n(t) \\ &+ \varepsilon_{i+3,i+4}^n N_{i+1}^n(t) + \varepsilon_{i+5,i+5}^n N_{i+5}^n(t) \end{aligned} \quad (4.81)$$

onde, para esta cadeia  $i = 33$ . As soluções para os três primeiros elementos desta cadeia são dadas pelas equações (4.66), (4.69) e (4.71). A solução para o quarto elemento (Sm147) será dada por

$$N_{i+3}^n(t) = \sum_{j=i}^{i+3} a_{i+3,j}^n e^{\varepsilon_{j,j}^n(t-t_{\ell-1})} - S_{i+3} \quad (4.82)$$

onde

$$a_{i+3,j}^n \equiv \begin{cases} \frac{\varepsilon_{i+3,j}^n}{(\varepsilon_{jj}^n - \varepsilon_{i+3,i+3}^n)} & \text{para } j = i \\ N_{i+3}^n(t_{\ell-1}) - \frac{\varepsilon_{j,i}^n}{(\varepsilon_{ii}^n - \varepsilon_{j,j}^n)} - S_j & \text{para } j = i + 3 \\ 0 & \text{para } j = i + 1, i + 2 \end{cases}$$

$$S_{i+3} \equiv \frac{S'_i}{\varepsilon_{i+3,i+3}^n} \quad (4.83)$$

A solução para o quinto elemento será

$$N_{i+4}^n(t) = \sum_{j=i}^{i+4} a_{i+4,j}^n e^{\varepsilon_{j,j}^n(t-t_{\ell-1})} + S_{i+4} \quad (4.84)$$

onde

$$a_{i+4,j}^n = \begin{cases} \frac{\varepsilon_{i+4,j}^n a_{i+1,j}^n + \varepsilon_{i+4,i+2}^n a_{i+2,j}^n}{(\varepsilon_{jj}^n - \varepsilon_{i+4,i+4}^n)} & \text{para } j \leq i + 2 \\ N_{i+4}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j'=i}^{i+3} a_{i+4,j'}^n - S'_{i+4} & \text{para } j = i + 4 \\ 0 & \text{para } j = i + 3 \end{cases}$$

$$S'_{i+4} \equiv \frac{\varepsilon_{i+4,i+2}^n S'_{i+2}}{\varepsilon_{i+4,i+4}^n} + \frac{\varepsilon_{i+4,i+1}^n S'_{i+1}}{\varepsilon_{i+4,i+4}^n} \quad (4.85)$$

e, ainda,  $a_{i+1,i+2}^n = a_{i+4,i+3}^n = 0$ .

A solução para o sexto elemento será

$$N_{i+5}^n(t) = \sum_{j=i}^{i+5} a_{i+5,j}^n e^{\varepsilon_{j,j}^n(t-t_{\ell-1})} + S_{i+4} \quad (4.86)$$



onde

$$a_{i+5,j}^n = \begin{cases} \frac{\varepsilon_{i+5,i+1}^n a_{i+1,j}^n + \varepsilon_{i+5,i+2}^n a_{i+2,j}^n + \varepsilon_{i+5,i+3}^n a_{i+3,j}^n + \varepsilon_{i+3,i+4}^n a_{i+4,j}^n}{(\varepsilon_{jj}^n - \varepsilon_{i+5,i+5}^n)} & \text{para } j \leq i+4 \\ N_{i+5}^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j'=i}^{i+4} a_{i+5,j'}^n - S_{i+5} & \text{para } j = i+5 \end{cases}$$

$$S_{i+5} \equiv \frac{-S'_{i+1} \varepsilon_{i+5,i+1}^n + S'_{i+2} \varepsilon_{i+5,i+2}^n + S_{i+3} \varepsilon_{i+5,i+3}^n + S'_{i+4} \varepsilon_{i+3,i+4}^n}{\varepsilon_{i+5,i+5}^n} \quad (4.87)$$

## 4.6 Aspectos gerais do método

Nesta seção descreveremos brevemente como o cálculo das concentrações isotópicas dos actínídeos e dos produtos de fissão é realizado dentro do código de simulação neutrônica, usando as equações apresentadas. A idéia é explicar, de maneira sucinta, como as equações conectam-se e como é obtida a concentração final dos nuclídeos.

O procedimento computacional será dividido em duas partes: preditor e corretor. Vamos considerá-las separadamente para explicitarmos as diferenças.

### *Preditor*

Vamos analisar um intervalo de queima genérico, digamos  $t_{\ell-1}$  até  $t_{\ell}$ . No início do intervalo de queima são conhecidas as concentrações isotópicas  $N_i^n(t_{\ell-1})$  e as seções de choque microscópicas  $\sigma_{xg}^i(t_{\ell-1})$  com as quais são obtidas as seções de choque macroscópicas  $\Sigma_{Xg}^n(t_{\ell-1})$ , para X representando captura, fissão, transporte e espalhamento.

De posse dos  $\Sigma_{Xg}^n(t_{\ell-1})$ , a equação de difusão estacionária é resolvida para ob-

termos o fluxo médio no nodo  $\bar{\phi}_g^n(t_{\ell-1})$ , que será considerado constante ao longo do intervalo de queima. Então, para resolvermos a equação de depleção neste intervalo de queima, qual seja

$$\frac{d}{dt}\mathbf{N}^n(t) = E_\ell^n \mathbf{N}^n(t) \quad t_{\ell-1} \leq t \leq t_\ell \quad (4.88)$$

os elementos da matriz de evolução  $E_\ell^n$  serão obtidos usando  $\sigma_{xg}^i(t_{\ell-1})$ ,  $N_i^n(t_{\ell-1})$  e  $\bar{\phi}_g^n(t_{\ell-1})$  que vem normalizado à potência de operação naquele intervalo de queima. Esta constante de normalização é obtida de tal forma que

$$C_{N,\ell} \sum_{n=1}^N \sum_{g=1}^G \omega \Sigma_{fg}^n(t_{\ell-1}) \bar{\phi}_g^n(t_{\ell-1}) V_n = f_{\text{carga}}^{(\ell)} P_{\text{nominal}} \quad (4.89)$$

onde  $0 \leq f_{\text{carga}}^{(\ell)} \leq 1$  é o fator de carga (nível de potência) no intervalo  $[t_{\ell-1}, t_\ell]$ ,  $P_{\text{nominal}}$  é a potência de projeto do reator,  $C_{N,\ell}$  é a constante de normalização do fluxo,  $N$  é o número total de nodos e  $V_N$  é o volume do nodo  $n$ .

Com isso, as concentrações isotópicas são calculadas no final do intervalo de queima, e são chamadas de preditoras ( $N_i^{n,\text{preditor}}(t_\ell)$ ). As seções de choque microscópicas também são obtidas para este instante ( $\sigma_{xg}^i(t_\ell)$ ) assim como as seções de choque macroscópicas  $\Sigma_{Xg}(t_\ell)$ . As concentrações preditoras médias no tempo serão dadas por

$$\bar{N}_{j,\ell}^{n,\text{preditor}} \equiv \frac{1}{\Delta t_\ell} \int_{t_{\ell-1}}^{t_\ell} N_j^{n,\text{preditor}}(t) dt \quad (4.90)$$

e também são calculadas para serem utilizadas nos produtos de fissão, para o cálculo preditor.

### **Corretor**

Com o fluxo de nêutrons e as seções de choque microscópicas calculados no final do intervalo de queima, na parte do cálculo preditor, estes valores são utilizados para calcularmos os novos elementos da matriz de evolução  $E_\ell^n$ , os quais são obtidos usando  $\sigma_{xg}^i(t_\ell)$ ,  $\bar{\phi}_g^n(t_\ell)$  e a nova constante de normalização do fluxo à potência

constante assim calculada

$$C_{N,\ell} \sum_{n=1}^N \sum_{g=1}^G \omega \Sigma_{fg}^n(t_\ell) \bar{\phi}_g^n(t_\ell) V_n = f_{\text{carga}}^{(\ell)} P_{\text{nominal}} \quad (4.91)$$

Agora, as concentrações isotópicas são novamente calculadas no final do intervalo e chamadas de corretoras ( $N_i^{n,\text{corretor}}(t_\ell)$ ). As concentrações médias no tempo, dadas por

$$\bar{N}_{j,\ell}^{n,\text{corretor}} \equiv \frac{1}{\Delta t_\ell} \int_{t_{\ell-1}}^{t_\ell} N_j^{n,\text{corretor}}(t) dt \quad (4.92)$$

também são calculadas para serem utilizadas no cálculo corretor das concentrações dos produtos de fissão.

Com as concentrações preditoras e corretoras, tanto para os actínídeos quanto para os produtos de fissão, as concentrações finais serão aproximadas pela seguinte média aritmética:

$$N_i^n(t_\ell) = \frac{1}{2} \left( N_i^{n,\text{corretor}}(t_\ell) + N_i^{n,\text{preditor}}(t_\ell) \right) \quad (4.93)$$

# Capítulo 5

## Resultados e Discussões

Neste capítulo, apresentamos os resultados obtidos através do método formulado nesta dissertação, para o cálculo das concentrações isotópicas dos núclídeos presentes no núcleo do reator, utilizando para isso um reator típico PWR composto por 121 elementos combustíveis (Angra 1).

O novo módulo de cálculo de depleção será incorporado ao código de simulação neutrônico desenvolvido pelo Programa de Engenharia Nuclear (PEN) da COPPE/UFRJ, com o intuito de avaliarmos a sua precisão e eficiência, quando comparado ao módulo atualmente utilizado no referido código. O método de cálculo das equações de depleção utilizado no código desenvolvido no PEN, tomado como referência, usa o método da matriz exponencial, descrito na seção 3.3.2. Este método será nomeado aqui, como método exponencial para diferenciá-lo do método proposto.

Em relação ao método proposto, cabe aqui uma ressalva. A idéia inicial da dissertação consistia em calcular as concentrações isotópicas para a parte da cadeia onde não existia realimentação de forma totalmente analítica. Porém, quando implementamos computacionalmente o método, nos deparamos com um erro de cancelamento numérico. Como a expressão final obtida pela resolução analítica da cadeia é expressa por um somatório, ao programarmos o módulo, constatamos que para pequenas queimas o somatório total das parcelas positivas e o somatório total das parcelas negativas a serem somadas possuem um valor próximo, em valor absoluto,

fazendo assim com que o computador cometa uma imprecisão de cálculo ao somar dígitos fora da precisão dupla com que a linguagem de programação FORTRAN usualmente utiliza. Esta imprecisão, levou à obtenção de concentrações isotópicas negativas em alguns nodos nos quais o núcleo foi dividido. Este método, na apresentação dos resultados, foi denominado de analítico.

Para contornarmos a dificuldade imposta pelo cancelamento numérico, adotamos uma alternativa em que fizemos uso tanto do método analítico quanto do método exponencial. Como as concentrações isotópicas devem ser calculadas em cada nodo, e o método analítico apresentava concentrações isotópicas negativas em alguns nodos, a rotina foi formulada permitindo que inicialmente as concentrações fossem calculadas com o método analítico. Nos nodos onde apresentavam valores negativos, o código recalculava as concentrações de todos os nuclídeos por meio do método exponencial. Este método será referenciado nessa seção como método híbrido.

Como um dos objetivos básicos desta dissertação é reduzir o tempo computacional, cabe aqui analisarmos os tempos de cálculo referentes ao módulos do código de simulação neutrônico desenvolvido pelo PEN/COPPE/UFRJ, simulando 1/4 de núcleo.

Tempo do cálculo de Depleção	53.89s
Tempo da Interpolação da Queima	0.95s
Tempo do Cálculo de Reconstrução	1.52s
Tempo da Pesquisa de Criticalidade	0.1s
Tempo do Cálculo do Fluxo de Nêutrons	14.06
Tempo da Realimentação Termohidráulica	0.02s
Tempo de Gravação de Arquivo de Dados	0.03s
Tempo de Cálculo das Queimas e Fluências	0.19s
Tempo de Cálculo da Distribuição de Potência	0.22s
Tempo da Interpolação nas Variáveis de Estado	3.03s

Por estes valores, podemos perceber claramente o que havíamos enfatizado: o módulo que consome maior tempo computacional é aquele referente ao cálculo das concentrações isotópicas. Na tabela 5.1 mostramos o tempo computacional gasto pelos três métodos para o cálculo das concentrações isotópicas, com o Código de simulação acima referido.

Tabela 5.1: *Tempo computacional gasto no módulo de depleção*

	<b>Tempo(s)</b>
Métodos	
Analítico	1.06
Exponencial	45.30
Híbrido	5.64

Nota-se nesta tabela que o ganho no tempo computacional com o uso do método analítico foi de aproximadamente 97%, enquanto no método híbrido foi em torno de 87%. Esta diferença resulta no emprego do método exponencial nos nodos onde as concentrações isotópicas resultaram em um valor negativo com o método analítico. Notamos que a diferença é pequena em virtude do cancelamento numérico ocorrer somente em alguns poucos nodos. Com o aumento da queima, com as concentrações aumentando, o cancelamento não ocorre mais e o método analítico é usado para todos os nodos.

Para exemplificar a utilização do método híbrido, vamos analisar os nodos axiais referentes ao décimo sétimo elemento combustível da configuração de 1/4 de núcleo, conforme a figura 5.1.

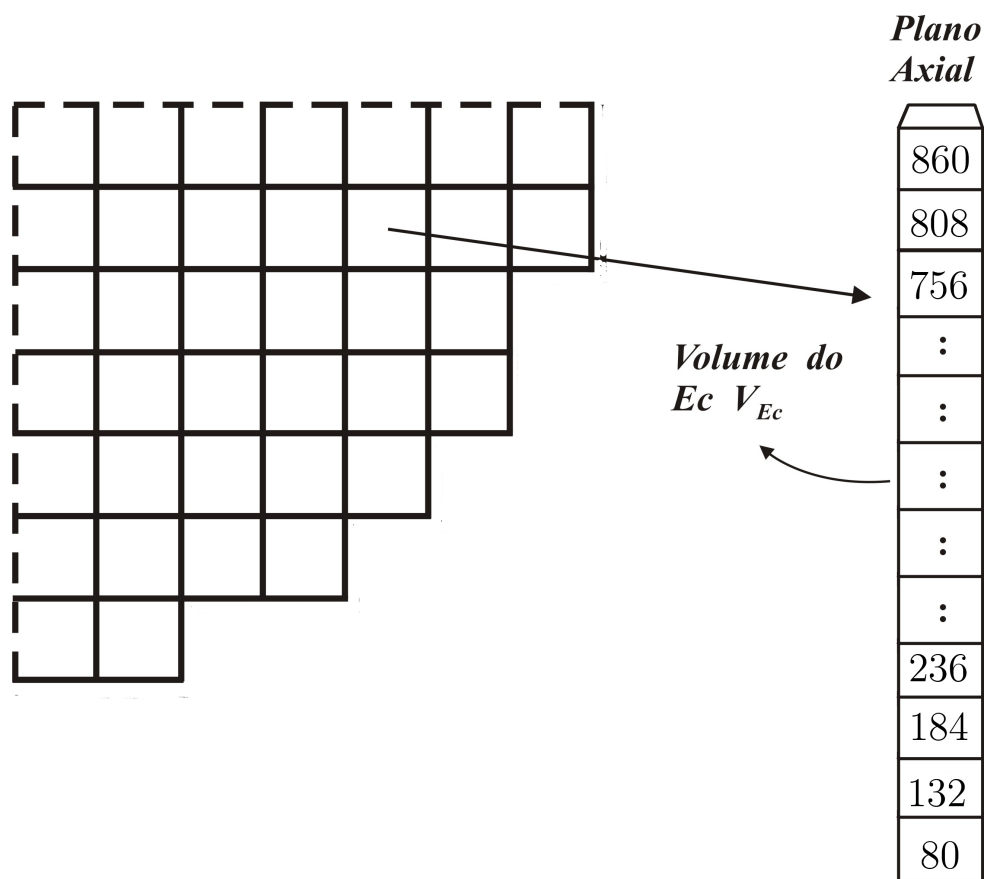


Figura 5.1: Distribuição axial de nodos no décimo sétimo elemento combustível

Iremos analisar os resultados obtidos do cálculo da concentração isotópica do nuclídeo  $Am^{243}$ , calculadas em dois intervalos de queima no início do período de queima. A escolha deste nuclídeo e destes dois instantes de tempo devem-se ao fato deste nuclídeo situar-se no fim da cadeia, apresentando concentrações isotópicas de valores relativamente baixos no início do período de queima apresentando portanto o fenômeno do cancelamento numérico. As tabelas 5.2 e 5.3 mostram as concentrações isotópicas (em átomos/barn.cm) deste nuclídeo.

Tabela 5.2: *Concentrações para o Am243 no instante 3 dias*

<b>Am243</b>		
Nodo	Método utilizado	Concentrações(átomos/barn.cm)
860	Exponencial	2.151E-22
808	Exponencial	3.580E-21
756	Analítico	6.939E-18
704	Exponencial	2.573E-19
652	Analítico	2.277E-18
600	Analítico	1.518E-18
548	Exponencial	4.481E-18
496	Analítico	1.100E-17
444	Analítico	8.132E-18
392	Analítico	5.882E-18
340	Analítico	7.047E-18
288	Analítico	2.168E-19
236	Exponencial	3.760E-19
184	Exponencial	4.170E-20
132	Exponencial	3.828E-21
80	Exponencial	2.453E-22

Tabela 5.3: *Concentrações para o Am243 no instante 6 dias*

<b>Am243</b>		
Nodos	Método utilizado	Concentrações(átomos/barn.cm)
860	Exponencial	1.580E-20
808	Exponencial	2.546E-19
756	Analítico	4.770E-18
704	Analítico	1.778E-17
652	Analítico	7.112E-17
600	Analítico	1.724E-16
548	Analítico	2.143E-16
496	Analítico	3.142E-16
444	Analítico	3.229E-16
392	Analítico	2.811E-16
340	Analítico	2.003E-16
288	Analítico	9.592E-17
236	Analítico	1.960E-17
184	Analítico	1.518E-18
132	Analítico	1.084E-19
80	Exponencial	1.697E-20

Podemos notar com estas tabelas a utilização do método híbrido: nos nodos onde as concentrações isotópicas apresentaram valores negativos, foram recalculadas todas as



concentrações isotópicas para os respectivos nodos, sendo que nas regiões onde foram obtidos valores positivos, foi mantida a formulação analítica. Podemos observar a diminuição do uso do método exponencial, em favor do método analítico com o passar do tempo. Essa redução já era esperada, em virtude do aumento dos valores das concentrações isotópicas. Esse aumento nos valores das concentrações ocorre de tal maneira, que já no instante de queima de 80 dias, não é utilizado o método exponencial. O uso cada vez menor do método exponencial favorece o ganho de tempo computacional, já que esse método é consideravelmente mais lento do que o método analítico.

As concentrações isotópicas (em átomos/barn.cm) dos nuclídeos  $Xe135$  e  $Sm149$ , dois importantes produtos de fissão, variando com o tempo, encontram-se na tabela 5.4, onde listamos as concentrações ao longo de todo o período de queima.

Tabela 5.4: *Concentrações do  $Xe135$  e do  $Sm149$  para os instantes de queima*

t(dias)	Xenônio	Samário
0	0	0
3	1.149E-09	6.029E-10
6	1.250E-09	1.866E-09
20	1.247E-09	7.805E-09
60	1.307E-09	1.415E-08
80	1.360E-09	1.507E-08
100	1.420E-09	1.559E-08
140	1.534E-09	1.629E-08
160	1.588E-09	1.661E-08
180	1.640E-09	1.692E-08
210	1.721E-09	1.734E-08
220	1.740E-09	1.751E-08
230	1.762E-09	1.765E-08
250	1.805E-09	1.794E-08
260	1.825E-09	1.808E-08
270	1.844E-09	1.823E-08
300	1.891E-09	1.872E-08
320	1.925E-09	1.897E-08
340	1.954E-09	1.922E-08
360	1.981E-09	1.943E-08
363	1.994E-09	1.935E-08
377	2.008E-09	1.945E-08
380	2.010E-09	1.947E-08

Na tabela 5.4 encontram-se somente os valores correspondentes ao cálculo utilizando o método híbrido, pois os resultados obtidos com os outros métodos foram idênticos. As figuras (5.2) e (5.3) mostram, graficamente, o comportamento no tempo destas concentrações isotópicas em um determinado nodo do núcleo do reator.

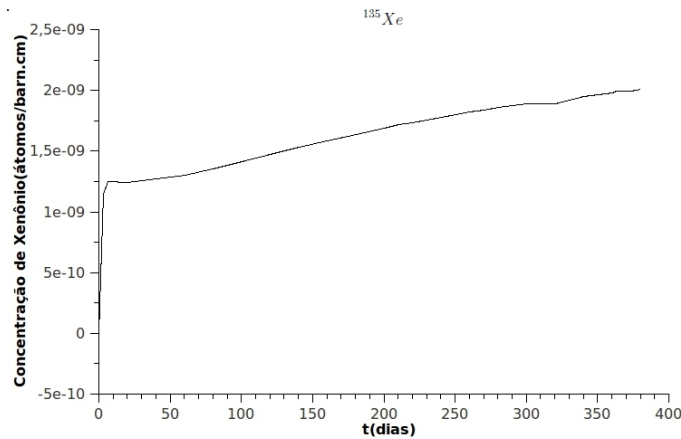


Figura 5.2: Concentração do Xenônio com o tempo

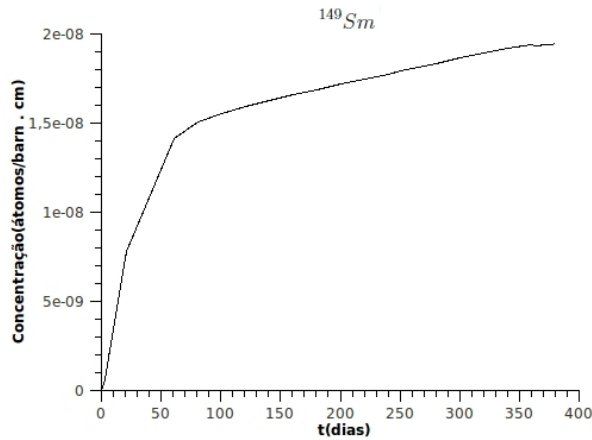


Figura 5.3: Concentração do Samário com o tempo

Nas figuras 5.4 a 5.11 apresentamos, graficamente, a evolução no tempo das concentrações isotópicas dos núclídeos  $^{235}\text{U}$ ,  $^{236}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$ ,  $^{242}\text{Pu}$ ,  $^{243}\text{Am}$ ,  $^{242}\text{Cm}$  e  $^{244}\text{Np}$  respectivamente. Ou seja, aqueles núclídeos situados no início da cadeia dos actinídeos, onde as concentrações eram suficientemente altas para não apresentarem o cancelamento numérico, e os núclídeos localizados no fim da cadeia, onde em geral ocorreu com maior frequência a imprecisão numérica.

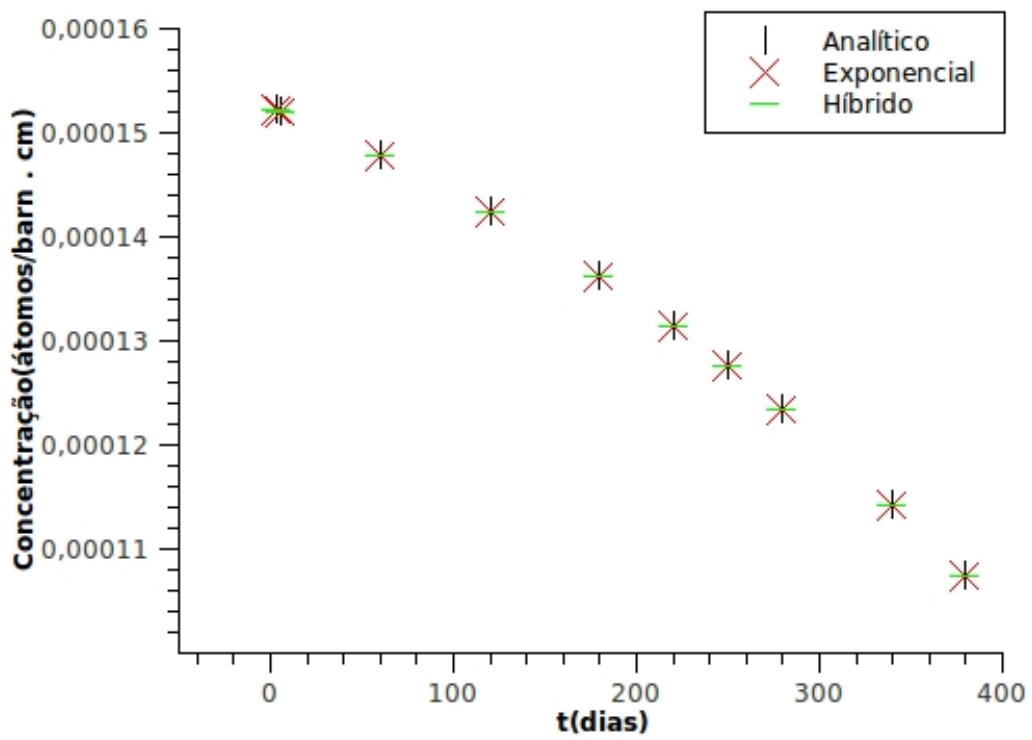


Figura 5.4: Concentração do U235 com o tempo

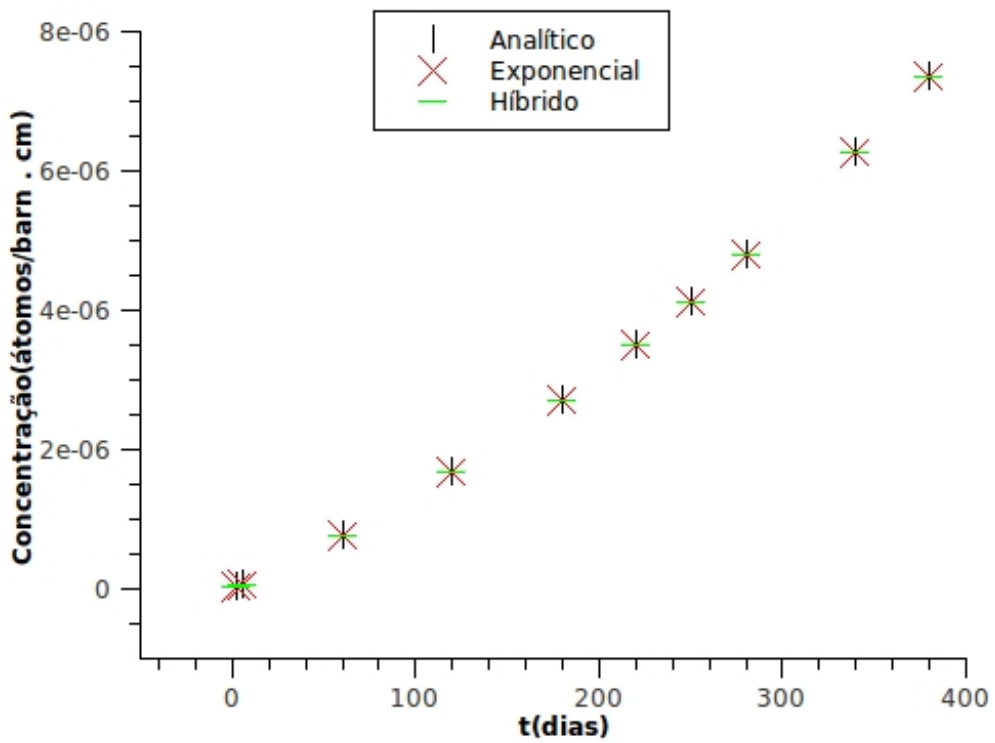


Figura 5.5: Concentração do U236 com o tempo

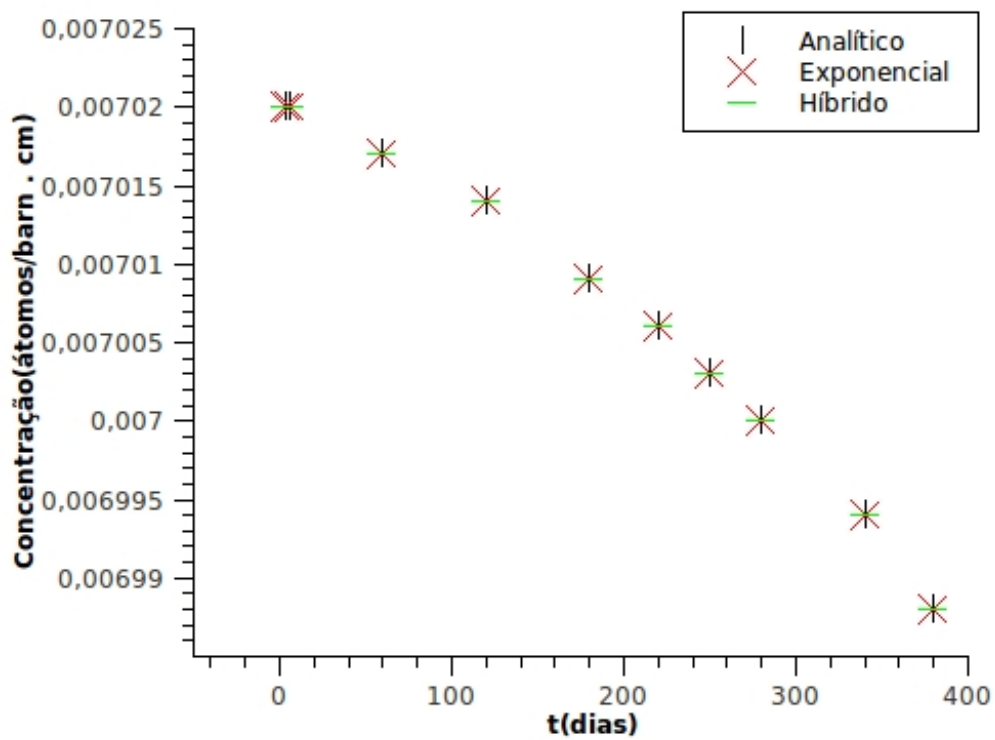


Figura 5.6: Concentração do U238 com o tempo

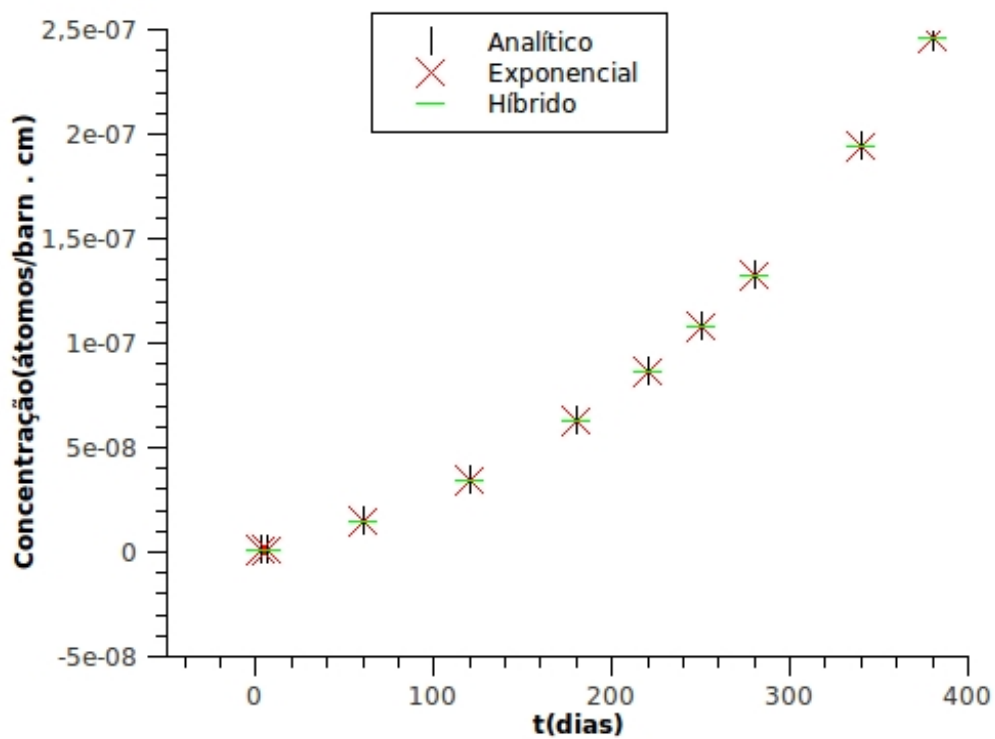


Figura 5.7: Concentração do Np237 com o tempo

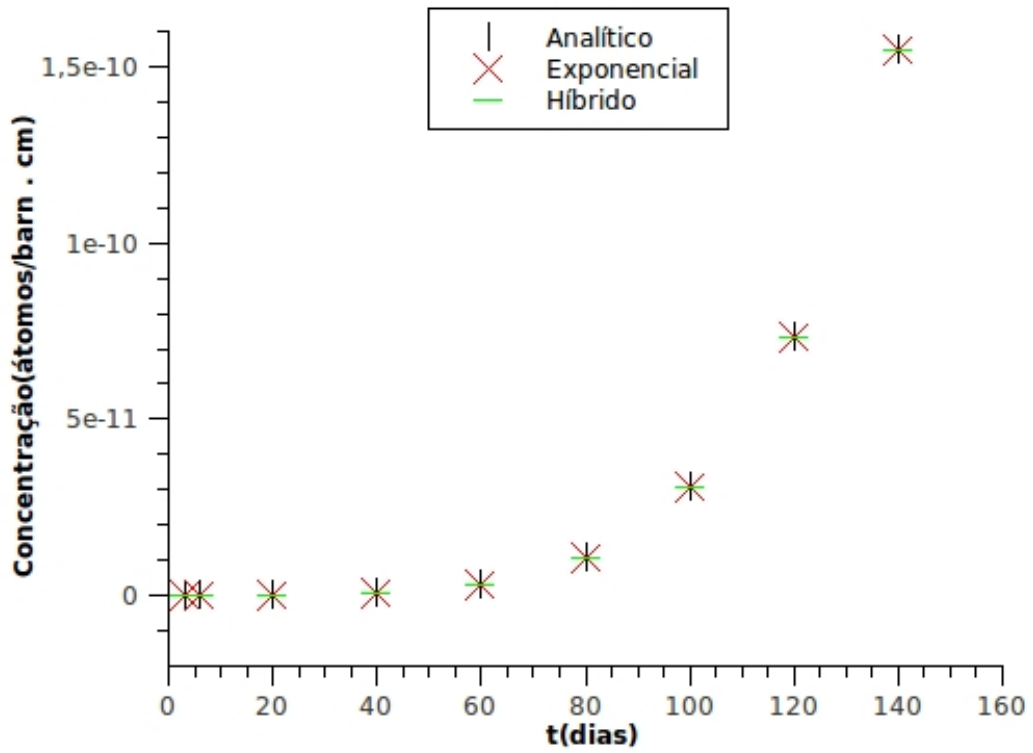


Figura 5.8: Concentração do Pu242 com o tempo

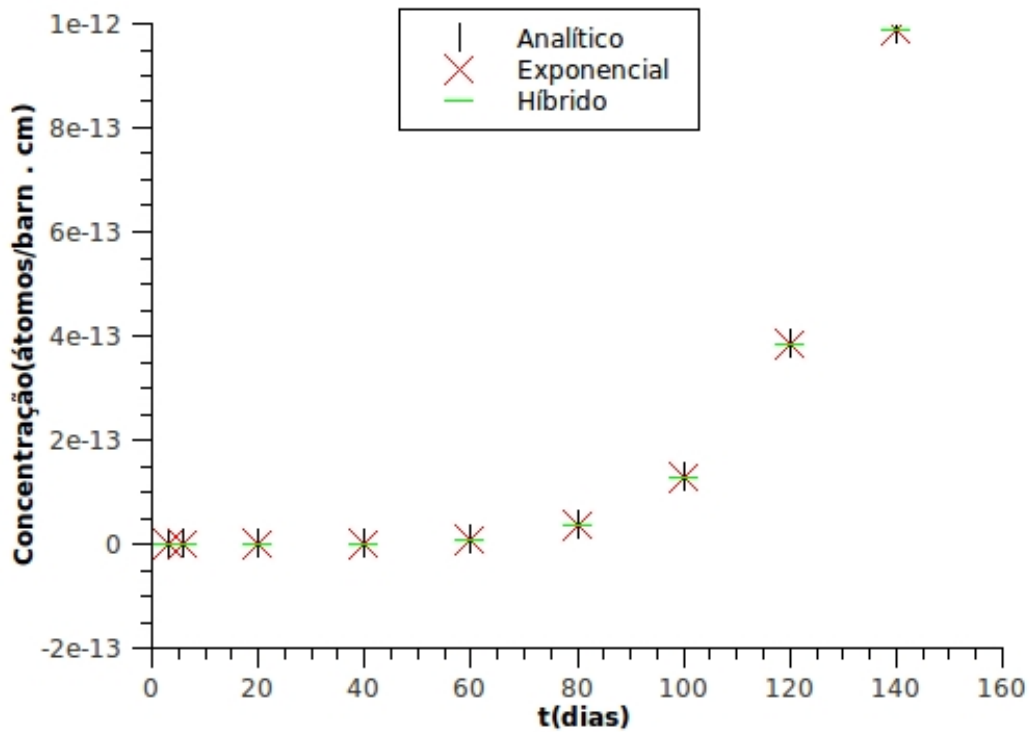


Figura 5.9: Concentração do Am243 com o tempo

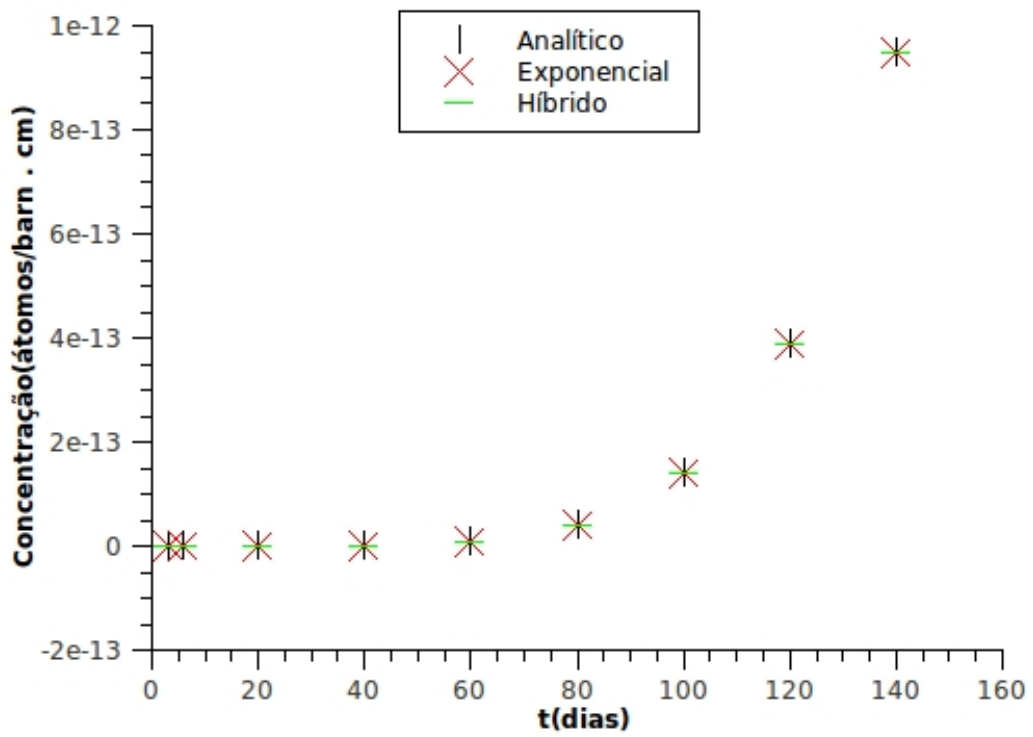


Figura 5.10: Concentração do Cm242 com o tempo

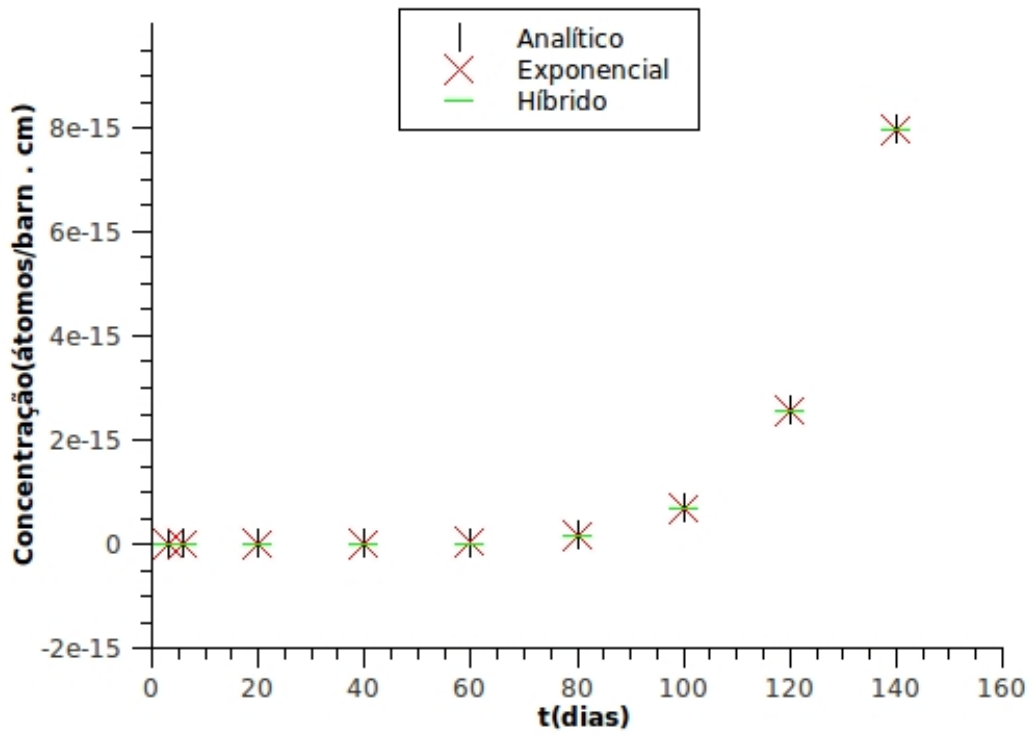


Figura 5.11: Concentração do Cm244 com o tempo

Podemos notar com estes gráficos a extrema compatibilidade dos resultados quando as concentrações isotópicas foram calculadas com os distintos métodos.

Outro parâmetro importante do reator é a concentração crítica de boro que o reator necessitará para manter-se crítico ao longo de sua operação. As concentrações utilizando os três métodos encontram-se na tabela 5.5, onde podemos ver a variação da concentração de boro com a queima.

Tabela 5.5: *Concentrações de boro com a queima*

Queima(MWD/kg)	Concentração de boro(ppm)		
	Analítico	Exponencial	Híbrido
0.113	1136	1136	1136
0.226	1116	1116	1116
0.753	1106	1106	1106
1.506	1088	1088	1088
2.259	1055	1055	1055
3.012	1008	1008	1008
3.765	954	954	954
4.518	897	897	897
5.271	836	836	836
6.024	773	773	773
6.777	709	709	709
7.530	642	642	642
7.906	609	609	609
8.283	575	575	575
8.659	540	540	540
9.036	505	505	505
9.412	470	470	470
9.789	435	435	435
10.165	400	400	400
10.542	364	364	364
11.295	293	293	293
12.048	221	221	221
12.801	149	149	149
13.554	78	78	78
13.667	68	68	68
14.043	32	32	32
14.194	18	18	18
14.307	8	8	8

Percebemos pelos resultados mostrados na tabela 5.5, que a precisão utilizando o método híbrido ou o método analítico manteve-se a mesma, apesar das sutis

diferenças nas concentrações isotópicas calculadas ao longo do período de queima.

Nas figuras 5.12 a 5.15 mostramos os valores apresentados por elemento combustível, para a razão entre a distribuição de potência local e a distribuição de potência no volume do elemento combustível (potência normalizada) resultantes da queima, calculada através das três metodologias. Nesta figura, estamos representando apenas 1/4 de núcleo. Apresentamos apenas resultados para quatro instantes de queima, 3, 6, 100 e 200 dias, correspondentes ao início e ao meio do período de queima. As figuras apresentadas referem-se a um corte bidimensional de 1/4 de núcleo, mas cabe lembrar que o tratamento da região por nodos é feita considerando a tridimensionalidade do núcleo.

<b>1.212</b>	<b>1.151</b>	<b>1.126</b>	<b>1.032</b>	<b>1.128</b>	<b>1.235</b>	<b>0.850</b>
<b>1.212</b>	<b>1.151</b>	<b>1.126</b>	<b>1.032</b>	<b>1.128</b>	<b>1.235</b>	<b>0.850</b>
<b>1.212</b>	<b>1.151</b>	<b>1.126</b>	<b>1.032</b>	<b>1.128</b>	<b>1.235</b>	<b>0.850</b>
<b>1.151</b>	<b>1.165</b>	<b>1.100</b>	<b>1.088</b>	<b>1.076</b>	<b>1.111</b>	<b>0.672</b>
<b>1.151</b>	<b>1.165</b>	<b>1.100</b>	<b>1.088</b>	<b>1.076</b>	<b>1.111</b>	<b>0.672</b>
<b>1.151</b>	<b>1.165</b>	<b>1.100</b>	<b>1.088</b>	<b>1.076</b>	<b>1.111</b>	<b>0.672</b>
<b>1.126</b>	<b>1.100</b>	<b>1.098</b>	<b>1.059</b>	<b>1.032</b>	<b>0.957</b>	
<b>1.126</b>	<b>1.100</b>	<b>1.098</b>	<b>1.059</b>	<b>1.032</b>	<b>0.957</b>	
<b>1.126</b>	<b>1.100</b>	<b>1.098</b>	<b>1.059</b>	<b>1.032</b>	<b>0.957</b>	
<b>1.032</b>	<b>1.088</b>	<b>1.059</b>	<b>1.031</b>	<b>1.015</b>	<b>0.617</b>	
<b>1.032</b>	<b>1.088</b>	<b>1.059</b>	<b>1.031</b>	<b>1.015</b>	<b>0.617</b>	
<b>1.032</b>	<b>1.088</b>	<b>1.059</b>	<b>1.031</b>	<b>1.015</b>	<b>0.617</b>	
<b>1.128</b>	<b>1.077</b>	<b>1.033</b>	<b>1.015</b>	<b>0.675</b>		
<b>1.128</b>	<b>1.077</b>	<b>1.033</b>	<b>1.015</b>	<b>0.675</b>		
<b>1.128</b>	<b>1.077</b>	<b>1.033</b>	<b>1.015</b>	<b>0.675</b>		
<b>1.235</b>	<b>1.111</b>	<b>0.960</b>	<b>0.616</b>			
<b>1.235</b>	<b>1.111</b>	<b>0.960</b>	<b>0.616</b>			
<b>1.235</b>	<b>1.111</b>	<b>0.960</b>	<b>0.616</b>			
<b>0.850</b>	<b>0.670</b>					
<b>0.850</b>	<b>0.670</b>					
<b>0.850</b>	<b>0.670</b>					

**Anali tico**  
**Exponencial**  
**Híbrido**

Figura 5.12: Distribuição de potência normalizada no instante 3 dias



1.207	1.147	1.123	1.033	1.127	1.233	0.851
1.207	1.147	1.123	1.033	1.127	1.233	0.851
1.207	1.147	1.123	1.033	1.127	1.233	0.851
1.147	1.161	1.099	1.088	1.077	1.109	0.673
1.147	1.161	1.099	1.088	1.077	1.109	0.673
1.147	1.161	1.099	1.088	1.077	1.109	0.673
1.124	1.100	1.098	1.061	1.033	0.957	
1.124	1.100	1.098	1.061	1.033	0.957	
1.124	1.100	1.098	1.061	1.033	0.957	
1.033	1.088	1.061	1.032	1.016	0.618	
1.033	1.088	1.061	1.032	1.016	0.618	
1.033	1.088	1.061	1.032	1.016	0.618	
1.128	1.078	1.034	1.016	0.677		
1.128	1.078	1.034	1.016	0.677		
1.128	1.078	1.034	1.016	0.677		
1.233	1.110	0.959	0.618			Analítico Exponencial Híbrido
1.233	1.110	0.959	0.618			
1.233	1.110	0.959	0.618			
0.850	0.671					
0.850	0.671					
0.850	0.671					

Figura 5.13: Distribuição de potência normalizada no instante 6 dias

1.241	1.212	1.198	1.140	1.111	1.096	0.734
1.241	1.213	1.198	1.140	1.111	1.096	0.734
1.241	1.212	1.198	1.140	1.111	1.096	0.734
1.213	1.223	1.213	1.147	1.100	1.005	0.590
1.213	1.223	1.213	1.147	1.100	1.005	0.590
1.212	1.223	1.213	1.147	1.100	1.005	0.590
1.199	1.213	1.270	1.137	1.021	0.878	
1.199	1.213	1.270	1.137	1.021	0.878	
1.199	1.213	1.270	1.137	1.021	0.878	
1.140	1.147	1.137	1.049	0.996	0.587	
1.140	1.147	1.137	1.049	0.996	0.587	
1.140	1.147	1.137	1.049	0.996	0.587	
1.111	1.101	1.022	1.049	0.657		
1.111	1.101	1.022	1.049	0.657		
1.111	1.101	1.022	1.049	0.657		
1.096	1.005	0.881	0.586			Analítico Exponencial Híbrido
1.096	1.005	0.881	0.586			
1.096	1.005	0.881	0.586			
0.734	0.588					
0.734	0.588					
0.734	0.588					

Figura 5.14: Distribuição de potência normalizada no instante 100 dias

1.191	1.187	1.196	1.194	1.104	1.044	0.701
1.191	1.187	1.196	1.194	1.104	1.044	0.701
1.191	1.187	1.196	1.194	1.104	1.044	0.701
1.187	1.201	1.045	1.161	1.123	0.969	0.570
1.187	1.201	1.045	1.161	1.123	0.969	0.570
1.187	1.201	1.045	1.161	1.123	0.969	0.570
1.196	1.245	1.181	1.176	1.021	0.855	
1.196	1.245	1.181	1.176	1.021	0.855	
1.196	1.245	1.181	1.176	1.021	0.855	
1.194	1.161	1.176	1.058	1.003	0.588	
1.194	1.161	1.176	1.058	1.003	0.589	
1.194	1.161	1.176	1.058	1.003	0.589	
1.104	1.123	1.021	1.003	0.664		
1.104	1.123	1.021	1.003	0.664		
1.104	1.123	1.021	1.003	0.664		
1.044	0.969	0.858	0.588			
1.044	0.969	0.858	0.588			
1.044	0.969	0.858	0.588			
0.701	0.568					
0.701	0.568					
0.701	0.568					

Analítico  
 Exponencial  
 Híbrido

Figura 5.15: Distribuição de potência normalizada no instante 200 dias

Com a comparação das figuras 5.12 a 5.15, percebemos que nos dois primeiros instantes, não houve qualquer diferença entre os valores apresentados com os três métodos, enquanto nos dois instantes seguintes ocorreu uma sutil diferença em um elemento combustível. Com isto, verificamos a precisão alcançada por meio dos três métodos no cálculo da potência, mesmo com a presença de concentrações isotópicas negativas no início do ciclo do reator.

# Capítulo 6

## Conclusões

Esta dissertação teve como objetivo desenvolver um método de cálculo das equações de depleção em uma cadeia de actínídeos com realimentação, utilizando para isso o método da decomposição e soluções analíticas.

O método proposto teve como motivação o desafio de reduzir o tempo computacional gasto para a obtenção das soluções das equações de depleção isotópica, uma vez que nos sistemas de simulação de núcleos de reatores, a maior parcela dos cálculos deve-se à análise da depleção do combustível. Outra motivação da metodologia apresentada, foi permitir o tratamento de reações de realimentação, cujo impacto, com a sua presença, nas concentrações críticas de boro, é considerável.

Um dos problemas encontrados na formulação da proposta original, foi devida à limitação numérica, chamada de cancelamento numérico. Este tipo de cancelamento ocorre quando são somados dois valores com módulos próximos entre si, possuindo sinais contrários. Este cancelamento foi limitante na resolução da parte da cadeia onde não existe realimentação, caracterizando portanto a matriz de depleção triangular inferior, onde, como vimos, a solução é dada por um somatório de termos. Encontramos, assim, concentrações negativas, em alguns nodos no início do período de queima, caracterizando uma condição distante da realidade física. Para contornarmos esta dificuldade, combinamos o método analítico com um método numérico para evitarmos as concentrações negativas, apenas nos nodos que apresentaram núclídeos com estas referidas concentrações.

Com os resultados obtidos, podemos perceber que houve uma redução significativa no tempo levado para a obtenção das concentrações isotópicas, ou seja, a solução das equações de depleção e, com isto, reduzindo consideravelmente também o tempo de cálculo dos sistemas que simulam núcleos de reatores do tipo PWR.

Uma sugestão de trabalho futuro é o desenvolvimento de um método para evitar a limitação imposta pelo cancelamento numérico, com o objetivo de utilizar as soluções analíticas desde o início do período de queima. Uma outra proposta seria o tratamento das realimentações no meio da cadeia, exigindo um desacoplamento um tanto mais complexo do que o proposto nesta dissertação. Por fim, poderíamos sugerir uma generalização da cadeia de actínídeos utilizada, evitando assim o tratamento restrito de uma cadeia fechada.

# Referências Bibliográficas

- [1] F.HENRY, A. *Nuclear-Reactor Analysis*. 1 ed. Cambridge, Mit Press, 1986.
- [2] H.BATEMAN. “Solution of a system of differential equations occurring in the theory of radio-active transformations”, *Math.Proc.Cambridge*, v. 15, pp. 423–427, 1910.
- [3] R.MORSS, L., M.EDELSTEIN, N., FUGER, J. *The Chemistry of the Actinides and Transactinides Elements*. 1 ed. , Springer, 2010.
- [4] J.DUDERSTADT, J., J.HAMILTON, L. *Nuclear Reactor Analysis*. 1 ed. , John Wiley & Sons, 1976.
- [5] H.FINEMANN, F.BENNERITZ, M.R.WAGNER. “Interface current techniques for multidimensional reactor calculations”, *Atomkernenergie*, v. 30, n. 123, 1977.
- [6] MOLER, C., LOAN, C. V. “Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix”, *Society for Industrial Applied Mathematics*, v. 20, n. 4, 10 1978.
- [7] ABOANBER, A. E. “Numerical solutions of the chain model of fission product nuclides.Effect on the reactivity of the reactor”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 28, pp. 923–933, 2001.
- [8] CETNAR, J. “General solution of the Bateman equations for nuclear transmutations”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 33, pp. 640–645, 2006.

- [9] S.PRESSYANOV, D. “Short solution of the radioactive decay chain equations”, *Am.J.Phys.*, v. 70, n. 4, April 2002.
- [10] YAMAMOTO, A., TATSUMI, M., SUGIMURA, N. “Numerical Solution of Stiff burnup Equation with Short Half Lived Nuclides by the krylov Subspace Method”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 44, n. 2, pp. 147–154, 2007.
- [11] M.S.RAYKIN, A.I.SHLYAKTHER. “Solution of Nuclide Burnup Equations using transition probabilities”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 102, pp. 54–63, 1989.
- [12] J.B.PLANT. “On the computation of transition Matrices for Time-Invariant Systems”. In: *Proceedings of the IEEE*, pp. 1397–1398, ago. 1968.
- [13] DA SILVA, F., THOMÉ, Z. “Depletion Calculations with static generalized perturbation theory”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 15, n. 8, pp. 431–434, 1988.
- [14] PUSA, M., LEPPANEN, J. “Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 164, pp. 140–150, 2010.
- [15] DE SOUZA JR., M. B., BERTOLI, S. L., BISCAIA, E. C. “Um procedimento numérico para o cômputo de matrizes de transição”, *Unpublished Notes*, v. 33, pp. 640–645, 2006.
- [16] DA SILVA, F., A.C.M.ALVIN, MARTINEZ, A. “Depletion Calculation for a Nodal Reactor Physics code”, *ICONE18*, 2010.

# Apêndice A

## Coeficientes das equações de depleção

### A.1 Matriz de depleção dos actínídeos

Os coeficientes da matriz de depleção que aparecem nas equações (4.1) a (4.17) possuem sua forma geral de acordo com a equação (2.4.2). Nesta seção explicitaremos todos os termos que aparecem nas equações de depleção. Vamos a eles:

*Para o  $^{234}\text{U}$*

$$h_{11}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^1 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{12}^n = 10^{-24} C_N \sigma_{n,2n}^2 \bar{\Phi}_1^n$$

**Para o  $^{235}\text{U}$**

$$h_{21}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^1 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{22}^n = 10^{-24} C_N \left[ \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^2 \bar{\Phi}_g^n + \sigma_{n,2ng}^n \bar{\Phi}_1^n \right]$$

$$h_{23}^n = 10^{-24} C_N \sigma_{n,2n}^3 \bar{\Phi}_1^n$$

**Para o  $^{236}\text{U}$**

$$h_{32}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^2 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{33}^n = 10^{-24} C_N \left[ \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^3 \bar{\Phi}_g^n + \sigma_{n,2ng}^3 \bar{\Phi}_1^n \right]$$

**Para o  $^{238}\text{U}$**

$$h_{44}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^4 \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{237}\text{Np}$**

$$h_{53}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^3 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{54}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^4 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{55}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^5 \bar{\Phi}_g^n$$



**Para o  $^{238}\text{Pu}$**

$$h_{65}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^5 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{66}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^6 \bar{\Phi}_g^n - \lambda_{\text{Pu}238}$$

**Para o  $^{239}\text{Np}$**

$$h_{74}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^4 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{77}^n = \lambda_{\text{Np}239}$$

**Para o  $^{239}\text{Pu}$**

$$h_{86}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^6 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{87}^n = \lambda_{\text{Np}239}$$

$$h_{88}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^8 \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{240}\text{Pu}$**

$$h_{98}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^8 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{99}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^9 (\bar{B}^n, X^n) \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{241}\text{Pu}$**

$$h_{109}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^9 \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{1010}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{10} \bar{\Phi}_g^n - \lambda_{\text{Pu}241}$$

**Para o  $^{241}\text{Am}$**

$$h_{1110}^n = \lambda_{\text{Pu}241}$$

$$h_{1111}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{11} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{242m}\text{Am}$**

$$h_{1211}^n = 0.115 \cdot 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{11} \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{1212}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{12} \bar{\Phi}_g^n - \lambda_{\text{Am}242m}$$

$^{242}\text{Am}$

$$h_{1311}^n = 0.885 \cdot 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{11} \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{1312}^n = \lambda_{\text{Am}242m}$$

$$h_{1313}^n = \lambda_{\text{Am}242}$$

**Para o**  $^{242}Pu$

$$h_{1410}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{10} \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{1414}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{14} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o**  $^{243}Am$

$$h_{1512}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{12} \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{1514}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{14} \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{1515}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{15} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o**  $^{242}Cm$

$$h_{1613}^n = 0.827 \lambda_{Am242}$$

$$h_{1616}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{16} \bar{\Phi}_g^n - \lambda_{Cm242}$$

**Para o**  $^{244}Cm$

$$h_{1715}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{15} \bar{\Phi}_g^n$$

$$h_{1717}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{17} \bar{\Phi}_g^n - \lambda_{Cm244}$$

## A.2 Produtos de fissão

Vamos agora explicitar os coeficientes que aparecem nas equações (4.24) a (4.44), correspondentes aos produtos de fissão, que possuem a sua forma geral dada por (4.21). São eles:

**Para o  $^{95}\text{Zr}$**

$$s_{18i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{18} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10, 14$$

e:

$$\varepsilon_{1818}^n = \lambda_{Zr95}$$

**Para o  $^{95}\text{Nb}$**

$$\varepsilon_{1918}^n = \lambda_{Zr95}$$

$$\varepsilon_{1919}^n = \lambda_{Nb95}$$

**Para o  $^{95}\text{Mo}$**

$$\varepsilon_{2019}^n = \lambda_{Nb95}$$

$$\varepsilon_{2020}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{20} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{103}\text{Ru}$**

$$s_{21i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{21} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10, 14$$

e:

$$\varepsilon_{2121}^n = \lambda_{Ru103}$$

**Para o  $^{103}Rh$**

$$\varepsilon_{2221}^n = \lambda_{Ru103}$$

$$\varepsilon_{2222}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{22} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{105}Rh$**

$$s_{23i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{23} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10$$

e:

$$\varepsilon_{2323}^n = \left( \lambda_{Ru103} + 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{23} \bar{\Phi}_g^n \right)$$

**Para o  $^{131}I$**

$$s_{24i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{24} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10, 14$$

e:

$$\varepsilon_{2424}^n = \lambda_{I131}$$

**Para o  $^{131}\text{Xe}$**

$$\varepsilon_{2524}^n = \lambda_{I131}$$

$$\varepsilon_{2525}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{25} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{135}\text{I}$**

$$s_{26i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{26} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10, 14$$

e:

$$\varepsilon_{2626}^n = \lambda_{I135}$$

**Para o  $^{135}\text{Xe}$**

$$s_{27i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{27} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10$$

e:

$$\varepsilon_{2726}^n = \lambda_{I135}$$

$$\varepsilon_{2727}^n = \left( \lambda_{Xe135} + 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{27} \bar{\Phi}_g^n \right)$$

**Para o  $^{143}\text{Pr}$**

$$s_{28i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{28} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10$$

e:

$$\varepsilon_{2828}^n = \left( \lambda_{Pr143} + 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{28} \bar{\Phi}_g^n \right)$$

**Para o  $^{143}Nd$**

$$\varepsilon_{2928}^n = \lambda_{Pr143}$$

$$\varepsilon_{2929}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{29} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{147}Pm$**

$$s_{30i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{30} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10$$

e:

$$\varepsilon_{3030}^n = \left( \lambda_{Pm147} + 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{30} \bar{\Phi}_g^n \right)$$

**Para o  $^{148m}Pm$**

$$\varepsilon_{3130}^n = 0.47 \times 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{30} \bar{\Phi}_g^n$$

$$\varepsilon_{3131}^n = \left( \lambda_{Pm148} + 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{31} \bar{\Phi}_g^n \right)$$

**Para o  $^{148}Pm$**

$$\varepsilon_{3231}^n = 0.046 \times \lambda_{Pm148m}$$

$$\varepsilon_{3232}^n = \lambda_{Pm148}$$

**Para o  $^{147}\text{Sm}$**

$$\varepsilon_{3330}^n = \lambda_{Pm147}$$

$$\varepsilon_{3333}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{33} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{149}\text{Pm}$**

$$s_{34i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{34} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10$$

e ainda

$$\varepsilon_{3431}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{31} \bar{\Phi}_g^n$$

$$\varepsilon_{3432}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{32} \bar{\Phi}_g^n$$

$$\varepsilon_{3434}^n = \lambda_{Pm149}$$

**Para o  $^{149}\text{Sm}$**

$$\varepsilon_{3531}^n = 0.954 \times \lambda_{Pm148m}$$

$$\varepsilon_{3532}^n = \lambda_{Pm148}$$



$$\varepsilon_{3533}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{cg}^{33} \bar{\Phi}_g^n$$

$$\varepsilon_{3534}^n = \lambda_{Pm149}$$

$$\varepsilon_{3535}^n = 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{35} \bar{\Phi}_g^n$$

**Para o  $^{155}\text{Eu}$**

$$s_{36i}^n = 10^{-24} C_N \Gamma_i^{36} \sum_{g=1}^2 \sigma_{fg}^i \bar{\Phi}_g^n \quad \text{para } i = 2, 3, 4, 5, 8, 9, 10$$

e:

$$\varepsilon_{3636}^n = \left( \lambda_{Eu155} + 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{36} \bar{\Phi}_g^n \right)$$

**Para o  $^{155}\text{Eu}$**

$$\varepsilon_{3736}^n = \lambda_{Eu155}$$

$$\varepsilon_{3737}^n = \left( \lambda_{Gd155} + 10^{-24} C_N \sum_{g=1}^2 \sigma_{ag}^{37} \bar{\Phi}_g^n \right)$$

Os valores para o rendimento do produto de fissão ( $\Gamma_i^k$ ), representando o número médio de núcleos  $i$  criados por fissão devido à fissão do núcleo  $k$ , encontram-se na tabela A.1.

Tabela A.1: *Rendimento dos produtos de fissão*

Rendimento								
Produtos de fissão	Actinídeos							
	$^{235}\text{U}$	$^{236}\text{U}$	$^{238}\text{U}$	$^{237}\text{Np}$	$^{239}\text{Pu}$	$^{240}\text{Pu}$	$^{241}\text{Pu}$	$^{242}\text{Pu}$
$^{95}\text{Zr}$	0.0649	0.0641	0.0511	0.0570	0.0489	0.0440	0.0407	0.0402
$^{103}\text{Ru}$	0.0304	0.0421	0.0623	0.0558	0.0695	0.0671	0.0615	0.0588
$^{105}\text{Rh}$	0.0097	0.0247	0.0397	0.0318	0.0541	0.0555	0.0615	0.0000
$^{131}\text{I}$	0.0288	0.0303	0.0259	0.0370	0.0387	0.0354	0.0284	0.0276
$^{135}\text{I}$	0.0630	0.0563	0.0683	0.0666	0.0645	0.0675	0.0707	0.0690
$^{135}\text{Xe}$	0.0024	0.0016	0.0003	0.0088	0.0115	0.0070	0.0023	0.0026
$^{143}\text{Pr}$	0.0594	0.0608	0.0456	0.0470	0.0443	0.0472	0.0470	0.0468
$^{147}\text{Pm}$	0.0225	0.0234	0.0253	0.0221	0.0204	0.0223	0.0237	0.0242
$^{149}\text{Pm}$	0.0107	0.0137	0.0161	0.0127	0.0124	0.0137	0.0152	0.0162
$^{155}\text{Eu}$	0.0019	0.0055	0.0080	0.0072	0.0099	0.0149	0.0145	0.0221