



## METODOLOGIA PARA A SOLUÇÃO ANALÍTICA DAS EQUAÇÕES DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA

Fabiano de Souza Prata

Tese de Doutorado 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 Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientador (es): Fernando Carvalho da Silva  
Aquilino Senra Martinez

Rio de Janeiro

Junho de 2016

METODOLOGIA PARA A SOLUÇÃO ANALÍTICA DAS EQUAÇÕES DE  
DEPLEÇÃO ISOTÓPICA

Fabiano de Souza Prata

TESE 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 DOUTOR EM  
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

---

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

---

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

---

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

---

Dr. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc.

---

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

---

Prof. Ricardo Carvalho de Barros, Ph.D.

---

Dr. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JUNHO DE 2016

Prata, Fabiano de Souza

Metodologia para a Solução Analítica das Equações de Depleção Isotópica/ Fabiano de Souza Prata. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2016.

XI, 137 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2016.

Referências Bibliográficas: p. 134-137.

1. Equações de depleção isotópica. 2. Subintervalos de queima. 3. Soluções Analíticas. 4. Actínídeos. I. Silva, Fernando Carvalho da *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Dedico este trabalho à Deus, aos meus pais Neli de Almeida Prata (in memorian) e Edna Maria de Souza Prata, e à minha esposa Michelle França Piloto.*

*“O que sabemos é uma gota; o  
que ignoramos é um oceano.”*  
*Isaac Newton*

# Agradecimentos

Agradecer não é tarefa fácil. Não pelo ato em si, mas pelo temor de não fazermos justiça ao esquecermos alguns daqueles que inspiraram as nossas ações para caminharmos em direção ao feliz destino que agora nos apresenta, materializado pela conclusão desta Tese.

Obviamente os que estão mais próximos de nós serão sempre lembrados, citados, comemorados, denominados. Porém, há tantos outros que se ofereceram ao diálogo, intencionalmente ou não, e fizeram parte dessa construção que também merecem meu muito obrigado, mesmo que não sejam explicitamente lembrados.

Agradeço primeiramente à Deus por me amparar nos momentos difíceis, me dar força interior para superar as dificuldades, mostrar os caminhos nas horas incertas e me suprir em todas as minhas necessidades.

Aos meus pais Neli de Almeida Prata (in memorian) e Edna Maria de Souza Prata, meus primeiros mestres, por toda paciência, dedicação, carinho e exemplos dignificantes que moldaram o meu caráter, assim como por ter acreditado em mim quando há anos atrás, decidindo por deixar a carreira militar, optei por estudar Física, o que culminou na elaboração deste trabalho.

À minha esposa Michelle França Piloto, a namorada que sempre esteve presente em meus pensamentos, por ter pacientemente suportado as minhas constantes ausências do seu carinhoso convívio para dedicar-me às longas horas de estudo. Agradeço constantemente à Deus por me permitir experienciar esse amor, por poder conviver com essa mulher incrível e única.

Ao meu irmão, por toda ajuda, orientação e conselhos ofertados desde pequeno. Tenho plena convicção que o seu exemplo impactou positivamente nas minhas escolhas profissionais, acadêmicas e religiosas.

Aos professores Fernando Carvalho da Silva e Aquilino Senra Martinez por todos esses anos de orientação. Agradeço a generosidade, sabedoria, disponibilidade, confiança e profundo respeito por mim e aos percalços do meu percurso na construção deste trabalho. Agradeço por terem me ensinado pacientemente, desde o Mestrado, através das suas aulas brilhantes, das reuniões, e de todos os pequenos momentos de conversa. Foi um prazer e uma honra ter tido essas duas figuras admiráveis como meus orientadores.

Ao meu amigo-irmão Fernando Luiz, pela agradável e reconfortante companhia desde a época da Faculdade. Não poderia imaginar o quão importante seria na minha vida. Obrigado pela amizade de todos esses anos.

Aos meus amigos(as) e companheiros(as) do PEN, obrigado por me fazer acreditar que eu tinha uma contribuição a dar, um projeto a consolidar no cenário acadêmico. Vocês alimentaram o meu desejo de continuar, e me apoiaram nos momentos mais difíceis. Obrigado por todas as conversas, conselhos e brincadeiras que ajudaram a fazer com que a passagem pela pós-graduação fosse uma incrível experiência. Daniela, Wanderson, Rafael, Dalton, Daniel, Cláudia, Igor, obrigado pelo apoio incondicional.

Aos meus ex-companheiros de docência, exímios professores e queridos amigos: Rosana e Carlos Eduardo.

Aos funcionários do PEN, por terem sempre me ajudado em tudo que precisei. Em todos os momentos, sempre pude perceber a sincera gentileza e disponibilidade em ser útil por parte de todos. Sei que contribuíram significativamente para o meu êxito. Liliane, Washington, Tania, Rosane, Reginaldo, Josevalda.

Agradeço a todas as pessoas que me deram o prazer da sua radiante presença em minha vida: a todos os meus amigos de infância, adolescência e fase adulta, mantidos com carinho em minha memória; meus amigos de escola, por todas as felizes experiências que tivemos; meus companheiros de faculdade, guerreiros incansáveis na busca pelo conhecimento; a todos os meus professores, desde a mais tenra infância, heróis da educação, por cada lição por eles ensinada e pela dedicação e empenho em formar cidadãos conscientes; a todos os alunos que me fizeram compreender um pouco mais sobre a difícil arte de lecionar. Peço perdão por todos que não foram citados nominalmente, mas saibam que lembro de todos os passos que me guiaram até aqui e reconheço a importância de cada um de vocês na minha caminhada. Serei sempre muito grato a todos.

Por fim, agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) pelo suporte financeiro.

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

## METODOLOGIA PARA A SOLUÇÃO ANALÍTICA DAS EQUAÇÕES DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA

Fabiano de Souza Prata

Junho/2016

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva  
Aquilino Senra Martinez

Programa: Engenharia Nuclear

Neste trabalho desenvolvemos um modelo analítico para o cálculo das equações de depleção isotópica, usando uma cadeia dos principais isótopos encontrados em um típico reator PWR. A cadeia analisada permite reações de realimentação do tipo alfa e  $(n, 2n)$ . O método baseia-se em uma metodologia analítica que desacopla as equações, utilizando o conceito de subintervalos de queima. O método foi implementado em um código de simulação neutrônico que faz uso do método de expansão nodal (NEM) para resolver a equação de difusão, descrevendo a distribuição espacial do fluxo de nêutrons dentro do núcleo do reator. Os resultados obtidos mostraram uma precisão satisfatória quando comparado às metodologias numéricas utilizadas para este tipo de cálculo.



Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

METHODOLOGY FOR ANALYTICAL SOLUTION OF ISOTOPIC DEPLETION  
EQUATIONS

Fabiano de Souza Prata

June/2016

Advisors: Fernando Carvalho da Silva  
Aquilino Senra Martinez

Department: Nuclear Engineering

In this work we developed an analytical model to calculate the isotopic depletion equations, using a chain of major isotopes found in a typical PWR reactor. The chain analyzed allows feedback reactions of alpha and  $(n, 2n)$  type. The method is based on an analytical methodology which decouples equations using the burnup subintervals concept. The method was implemented in a PWR reactor simulation code that makes use of the nodal expansion method (NEM) to solve the neutron diffusion equation, describing the spatial distribution of neutron flux inside the reactor core. The results obtained showed satisfactory precision when compared to numerical methods used for this type of calculation.

# Índice

<b>1 Introdução .....</b>	<b>1</b>
1.1 Usinas Nucleares .....	1
1.2 Módulo de depleção.....	2
1.3 Motivação.....	7
1.4 Organização dos capítulos .....	9
<b>2 As Equações de Depleção Isotópica .....</b>	<b>10</b>
2.1 Introdução .....	10
2.2 Definições .....	11
2.3 Obtenção das equações de depleção .....	15
2.3.1. Termo de absorção.....	16
2.3.2 Termo de decaimento.....	18
2.3.4 As equações para os actínídeos e os produtos de fissão .....	20
2.4 Método Nodal.....	28
2.4.1 Equação de Balanço Nodal .....	29
2.4.2 Equações de Acoplamento Nodal.....	32
2.4.3 Coeficientes Primários .....	33
2.4.4 Coeficientes Secundários .....	35
2.4.5 Correntes Parciais de Saída .....	37
2.4.6 Equação para o Fluxo médio .....	38
2.5 As equações de depleção nodalizadas .....	38
<b>3 Métodos de solução.....</b>	<b>42</b>
3.1 Métodos de cadeias lineares.....	42
3.1.1 Soluções de Bateman .....	43
3.1.2 Solução geral analítica .....	44
3.2 Métodos utilizando a matriz exponencial .....	45
3.2.1 Métodos de Séries.....	46
3.2.1.1 Série de Taylor.....	46
3.2.1.2 Aproximação de Padé.....	46

3.2.1.3	Scaling and squaring .....	47
3.2.1.4	Aproximação Racional de Chebyshev .....	49
3.2.2	Métodos Polinomiais .....	49
3.2.2.1	Interpolação de Lagrange .....	50
3.2.2.2	Interpolação de Newton.....	50
3.2.2.3	Vandermonde.....	51
3.2.3	Métodos de decomposição .....	52
3.2.3.1	Autovetores e autovalores .....	52
3.2.3.2	Método de Shur Parlett.....	54
3.2.4	Métodos de equações diferenciais ordinárias.....	54
3.2.5	Método de Potenciação e polinômios ortogonais.....	56
<b>4</b>	<b>Método Proposto .....</b>	<b>58</b>
4.1	Introdução .....	58
4.2	Cadeia dos Actinídeos e suas respectivas equações .....	58
4.3	Subintervalos de queima .....	64
4.3.1	Realimentações tratadas como fontes .....	65
4.3.1.1	Preditor -Subintervalo ímpar .....	66
4.3.1.2	Preditor -Subintervalo par .....	77
4.3.1.3	Corretor -Subintervalo ímpar.....	83
4.3.1.4	Corretor -Subintervalo par.....	87
4.3.2	Desacoplamento das Realimentações .....	91
4.4	Esquema de acoplamento.....	100
<b>5</b>	<b>Resultados e discussões .....</b>	<b>106</b>
<b>6</b>	<b>Conclusões.....</b>	<b>132</b>
	<b>Referências Bibliográficas .....</b>	<b>134</b>

# 1 Introdução

## 1.1 Usinas Nucleares

Desde a primeira vez que um reator nuclear tornou-se crítico em 1942, os reatores nucleares vêm sendo desenvolvidos a partir de dispendiosas ferramentas de pesquisa em centrais nucleares economicamente competitivas. Atualmente existem 435 reatores nucleares em operação em 31 países, com uma capacidade de geração elétrica acima de 370 GWe. Em 2011 foram produzidos 2518 bilhões de KWh, aproximadamente 13,5% da eletricidade mundial. Mais de 60 reatores nucleares estão, atualmente, sendo construídos em 13 países, com destaque para China, Coreia do Sul e Rússia. Mesmo após o acidente de Fukushima no Japão, espera-se que a produção de energia por meio nuclear cresça em 60% até 2035 (NICOLAU, 2014). É esperado, no futuro, que a energia nuclear não só será capaz de atender à crescente demanda de eletricidade, mas que também poderá ser usada como fonte de energia no aquecimento urbano, para gerar hidrogênio e para dessalinizar a água (NERAC, 2002). Embora a atual geração de usinas nucleares produza eletricidade a custos competitivos, elas possuem altos custos de construção. No Brasil, a busca pela tecnologia nuclear iniciou-se na década de 50 e atualmente existem dois reatores nucleares do tipo PWR em operação: Angra 1 e Angra 2, situados no sudeste do Brasil na baía de Itaorna em Angra dos Reis, que são responsáveis por produzirem mais de 1900 MW de potência, correspondendo a um total de 2,3% de toda a energia gerada no país. Além desses dois reatores em funcionamento, estima-se a construção de no mínimo quatro novas Usinas Nucleares em todo o território brasileiro nos próximos 20 anos (NICOLAU, 2014).

Para a otimização do projeto, construção, operação e descomissionamento de uma nova planta nuclear de potência, é fundamental o conhecimento dos processos físicos que ocorrem na planta. Em virtude da complexidade desses processos, uma vasta gama de códigos computacionais são usados para compreender, modelar e prever o comportamento das plantas nucleares de potência. Com o intuito de atender aos objetivos de sustentabilidade, viabilidade econômica, segurança e confiabilidade, há a imperiosa necessidade de modelar o comportamento da usina nuclear tão precisamente quanto possível. Por exemplo, para atender ao objetivo de segurança, deve-se controlar

continuamente a possibilidade de liberação de produtos de fissão radioativos para o meio ambiente. Nesse sentido, é extremamente importante poder prever através da modelagem matemática e computacional a quantidade de produtos de fissão no reator e os seus comportamentos esperados diante de vários cenários de acidente. Outro exemplo, relacionado à viabilidade econômica, é que para a usina ser econômica em operação, ela deve otimizar o uso do combustível, o que por sua vez será importante para modelar a queima do combustível, a geração e transporte de calor para o gerador de vapor, e a eficiência na geração de eletricidade.

Um sistema de análise do núcleo do reator consiste em um número de módulos que resolvem diferentes tipos de equações que modelam matematicamente o comportamento do núcleo do reator. Alguns desses módulos são o módulo termo-hidráulico que calcula a temperatura, pressão e perfis de densidade no núcleo, o módulo reatividade-potência-fluxo que gera soluções para a equação da difusão de nêutrons, e o módulo de depleção que descreve a quantidade de cada isótopo presente no núcleo do reator (DUDERSTADT, 1975).

O considerável aumento na capacidade de processamento dos computadores nas últimas décadas, ao lado de novos métodos de cálculo que estão sendo constantemente desenvolvidos, torna possível a modelagem dos reatores nucleares com maior riqueza de detalhes do que no passado. A proposta desta tese é o estabelecimento de uma metodologia que possa ser usada para otimizar o módulo de depleção no código neutrônico desenvolvido pela COPPE/PEN/UFRJ.

Alguns termos, que serão usados ao longo desta tese, são introduzidos na seção 1.2 antes da visão geral do módulo de depleção. Na seção 1.3 é apresentada a motivação da tese em maiores detalhes. Por fim, na seção 1.4 é mostrado como se dará a organização do presente trabalho.

## 1.2 Módulo de depleção

Uma usina nuclear utiliza a energia liberada por reações de fissões nucleares que ocorrem dentro do núcleo do reator. A energia é liberada dentro de um número grande

de elementos combustíveis que estão envoltos por um fluido refrigerante capaz de transportar o calor liberado pelo núcleo.

No contexto de reatores nucleares, devemos distinguir entre duas classes de núclídeos fissionáveis: núclídeos fisséis e núclídeos férteis. Um núclídeo fissil é aquele para o qual a fissão pode ser induzida por nêutrons com uma energia cinética essencialmente nula (ou por nêutrons térmicos com energias cinéticas muito baixas, pelo menos quando comparado com as energias nucleares). Para tais núclídeos, a fissão induzida por nêutrons térmicos é possível devido ao fato da energia de ligação do nêutron ser suficiente para que o núclídeo rompa a sua barreira de fissão. Como exemplo de núclídeos fisséis, podemos citar o  $^{233}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ,  $^{239}\text{Pu}$  e o  $^{241}\text{Pu}$  (DUDERSTADT, 1975).

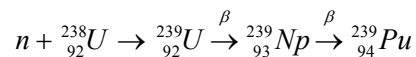
Por outro lado, para a maioria dos núclídeos pesados, a energia de ligação adicional proporcionada pela captura do nêutron não é suficiente para que o núcleo rompa a sua barreira de fissão. Para tais núclídeos, é necessário que o nêutron incidente possua uma energia adicional à sua energia de ligação, por exemplo, uma energia cinética da ordem de  $\text{MeV}$  (caracterizando nêutrons rápidos) capaz de fazer com que a barreira de fissão seja rompida. Os núclídeos que podem ser fissionados por tais nêutrons rápidos são classificados como núclídeos férteis. Embora tais núclídeos desempenhem um papel relevante como combustíveis nucleares, eles são incapazes de sustentar por si mesmos uma reação nuclear em cadeia de forma estável, sendo necessário, portanto, combiná-los com um núclídeo fissil tal como o  $^{235}\text{U}$  ou o  $^{239}\text{Pu}$ . Alguns exemplos de núclídeos férteis são:  $^{232}\text{Th}$ ,  $^{238}\text{U}$  e o  $^{240}\text{Pu}$  (DUDERSTADT, 1975).

As reações de fissões ocorrem quando um isótopo fissionável, como o  $^{235}\text{U}$ , se divide ou é fissionado dando origem a isótopos leves, chamados produtos de fissão. Essas reações normalmente ocorrem quando um isótopo fissionável captura um nêutron livre, mas também pode ocorrer espontaneamente. Em cada reação de fissão apenas alguns nêutrons são liberados, os quais são necessários para estabelecer uma reação em cadeia. Para que a liberação de energia seja contínua, o número de nêutrons livres deve permanecer constante com o tempo, sendo o reator, com essas características, chamado de crítico. Se o número de nêutrons aumentar ou diminuir com o tempo, o reator é

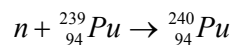
chamado de supercrítico ou subcrítico, respectivamente. O número de nêutrons é controlado através da inserção ou retirada de isótopos absorvedores de nêutrons.

Um mesmo tipo de isótopo fissionável pode se dividir em um grande número de diferentes produtos de fissão. Essa divisão estará associada a uma probabilidade de ocorrência de cada um dos pares resultantes da fissão. Muitos dos produtos de fissão são isótopos instáveis e, portanto, irão decair radioativamente. Quando um isótopo sofre uma reação que resulte em um isótopo novo, o isótopo original é chamado de isótopo pai ou precursor e o novo isótopo é chamado de isótopo filho. Alguns produtos de fissão sofrem inúmeros decaimentos radioativos antes de se tornarem estáveis. Os produtos de fissão também podem capturar um nêutron formando um isótopo novo, que normalmente é instável.

Como exemplo da interação entre os isótopos físeis e férteis, podemos citar a transmutação que ocorre no  $^{235}\text{U}$ . Ao capturar um nêutron, o nuclídeo fértil  $^{238}\text{U}$  pode levar ao  $^{239}\text{Pu}$ :



Pelo fato do  $^{239}\text{Pu}$  ser um nuclídeo fissil, se um nêutron de qualquer energia incidir sobre ele, existe uma alta probabilidade da partícula causar uma fissão nuclear. Contudo, existe uma pequena probabilidade do  $^{239}\text{Pu}$  simplesmente capturar o nêutron, resultando na reação:



ou seja, é gerado novamente um nuclídeo fértil, o  $^{240}\text{Pu}$ . Se ele capturar outro nêutron ele dará origem ao  $^{241}\text{Pu}$ , que é um isótopo fissil.

As mudanças nas concentrações isotópicas dos isótopos físeis e férteis e dos produtos de fissão no elemento combustível ao longo do tempo são chamadas de depleção do combustível. Essa depleção está associada à quantidade de energia que é

liberada para uma dada quantidade inicial de isótopos físeis, caracterizando a queima do combustível, sendo normalmente utilizada a unidade megawatt-dia por tonelada ( $MWD/t$ ).

Dentre as várias razões para manter e otimizar o controle da queima do combustível para cada elemento combustível no núcleo do reator podemos citar algumas:

- a) Pelo fato de alguns produtos de fissão, como o  $^{135}\text{Xe}$ , poderem facilmente capturar nêutrons (possui alta seção de choque de captura), as mudanças desses isótopos podem tornar o reator subcrítico ou supercrítico. Sendo assim, é importante a monitoração do aparecimento desses produtos de fissão de tal forma que o controle dos ajustes necessários para manter o reator crítico possa ser feito.
- b) Durante a queima, a quantidade de isótopos físeis é alterada e a quantidade de produtos de fissão aumenta. Após algum tempo, os elementos combustíveis alcançam um nível de queima onde muito mais nêutrons livres são absorvidos do que produzidos no elemento combustível, levando à necessidade de substituição do mesmo.
- c) Para alcançar uma distribuição uniforme de potência no núcleo, combustíveis com diferentes níveis de queima são colocados em diferentes posições no núcleo do reator. Isso é feito através da colocação de combustíveis com um alto nível de queima em lugares onde existem mais nêutrons e combustíveis com níveis de queima menores em regiões com menos nêutrons, com o intuito de alcançar uma mesma taxa de fissão por elemento de fissão. Desse modo, algumas vezes é necessário trocar elementos combustíveis com níveis diferentes de queima para alcançar a esperada distribuição uniforme de potência.
- d) Alguns produtos de fissão que são formados estão no estado gasoso. Conforme esses produtos de fissão são criados, a vareta combustível torna-se pressurizada. Durante uma condição postulada de acidente, alguns produtos



de fissão também podem migrar dos elementos combustíveis em direção ao fluido refrigerante. Portanto, durante o projeto dos elementos combustíveis, é necessário saber o quanto de cada produto de fissão pode ser formado.

O módulo de depleção contido em um código de simulação neutrônico calcula a concentração isotópica de cada nuclídeo presente no núcleo como função do tempo. Isso é feito através da solução das equações de depleção que descrevem a taxa de mudança na concentração isotópica de cada isótopo no núcleo devido ao decaimento radioativo, captura radiativa e fissão. Usando algumas aproximações, que serão descritas no Capítulo 2, essas equações de depleção podem ser escritas como um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem,

$$\frac{d}{dt} \tilde{N}(t) = \tilde{E} \tilde{N}(t) \quad (1.1)$$

com a condição inicial para  $t = 0$ :

$$\tilde{N}(0) = \tilde{N}_0(t) \quad (1.2)$$

onde  $\tilde{N}$  é o vetor contendo as concentrações de todos os isótopos, sendo dado por:

$$\tilde{N} \equiv \begin{bmatrix} N_1(t) \\ N_2(t) \\ \vdots \\ N_m(t) \end{bmatrix} \quad (1.3)$$

Na equação (1.3) o elemento  $N_m(t)$  representa a concentração isotópica do último nuclídeo da cadeia de depleção a ser analisada. A matriz  $\tilde{E}$  é chamada de matriz de evolução do sistema e contém todas as constantes de decaimento radioativo, seções de choque de fissão e de captura neutrônica dos isótopos. Assim, o principal objetivo do módulo de depleção é resolver o sistema de equações de depleção do combustível dado pelas equações acima.

## 1.3 Motivação

O presente trabalho destina-se ao aperfeiçoamento da dissertação (PRATA, 2011), onde foi proposto um método de cálculo das equações de depleção em uma cadeia de actínídeos composta por 17 elementos, onde houve a consideração de realimentações, por meio de reações  $(n, 2n)$ , entre os primeiros três primeiros nuclídeos da cadeia, utilizando o método da decomposição entre esses elementos e soluções analíticas para o restante da cadeia.

Esse método teve como motivação o desafio de reduzir o tempo computacional gasto para a obtenção das soluções das equações de depleção isotópica, uma vez que pelo procedimento adotado no código de simulação, a maior parcela dos cálculos devia-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, é considerável nas concentrações críticas de boro. Um dos problemas encontrados na formulação da proposta original foi devido à limitação numérica obtida: o cancelamento numérico. Esse tipo de cancelamento ocorre quando são somados valores com módulos próximos entre si, possuindo sinais contrários. Esse cancelamento foi limitante na resolução da parte da cadeia onde as realimentações foram suprimidas, para permitir soluções analíticas (quarto ao décimo sétimo nuclídeo), caracterizando, portanto, a matriz de depleção como triangular inferior, onde a solução é dada por um somatório de termos.

Ao implementarmos a metodologia, algumas concentrações de nuclídeos situados no final da cadeia, resultaram em valores negativos em algumas regiões espaciais no início do período de queima, caracterizando uma condição distante da realidade física. Para contornarmos essa dificuldade, combinamos o método analítico com um método numérico (método da potenciação e polinômios ortogonais, descrito no capítulo 3) para evitarmos as concentrações negativas, apenas nas regiões que apresentaram nuclídeos com tais anomalias.

Com os resultados obtidos, foi possível perceber uma redução significativa no tempo computacional gasto para a obtenção das concentrações isotópicas, ou seja, a solução

das equações de depleção, com isto reduzindo consideravelmente também o tempo de cálculo do código de simulação nêutronico desenvolvido pelo Programa de Engenharia Nuclear (PEN) da COPPE/UFRJ, utilizado como referência.

Diante do exposto, podemos agora compreender com mais clareza o objetivo do nosso trabalho atual. Ele se resume em três pilares:

- 1) Desenvolver 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.
- 2) Substituir o método numérico de desacoplamento utilizado entre os primeiros núclídeos da cadeia, por um método analítico.
- 3) Tratar as realimentações, por meio de reações de decaimento alfa, que ocorrem em toda a cadeia, e não somente as realimentações ocorridas entre os três primeiros actínídeos.

Além desses três objetivos, convém ressaltar que permanece o compromisso de otimizar o tempo computacional gasto no módulo de depleção, através de soluções analíticas, quando comparado às alternativas de soluções numéricas para as equações de depleção.

Diante do exposto, podemos dizer resumidamente que, nesta tese de Doutorado, está se propondo um método para a resolução das equações de depleção isotópica, para reatores nucleares do tipo PWR, em esquemas nodais de malha grossa, usando soluções analíticas, considerando todas as realimentações presentes na cadeia, e evitando o problema da perda de algarismos significativos quando tais soluções são usadas nos sistemas de cálculos neutrônicos para simulações de tais reatores.

## 1.4 Organização dos capítulos

No desenvolvimento das metodologias para a solução das equações de depleção, as propriedades especiais do sistema de equações devem ser exploradas. Primeiramente, no capítulo 2, as equações de depleção do combustível são derivadas a partir do balanço entre perdas e ganhos decorrentes de reações nucleares que ocorrem no núcleo. Na derivação das equações é mostrado como é feito o tratamento matemático para lidar com a dependência da matriz de evolução em relação ao espaço, tempo e energia.

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 (BATEMAN, 1910), e a proposta numérica que, em geral, exige um maior tempo computacional de cálculo.

No capítulo 4, é apresentado o método proposto. Serão apresentadas as soluções encontradas para os três objetivos descritos na Seção 1.3, ou seja, o tratamento completo das realimentações presentes na cadeia, por meio dos acoplamentos existentes através de reações de decaimento alfa e reações  $(n, 2n)$ , assim como a abordagem do problema de cancelamento numérico surgido com as expressões analíticas e a substituição do método numérico presente no início da cadeia.

No capítulo 5, são apresentados os resultados alcançados com a metodologia proposta no capítulo anterior, além de uma breve discussão sobre os resultados obtidos.

Por fim, no capítulo 6 apresentamos as conclusões referentes a esta tese de doutorado e serão feitas algumas sugestões para trabalhos futuros.

## 2 As Equações de Depleção Isotópica

### 2.1 Introdução

Nos últimos anos, uma série de estratégias foram criadas para lidar com as dificuldades numéricas associadas com a previsão de transmutações nucleares (SALVATORES *et al.*, 1994, VUKADIN, 1994, RAYKIN, SHLYAKTHER, 1989, MILES, 1981). O tema da transmutação nuclear é de considerável interesse em um grande número de áreas científicas, incluindo a produção de radionuclídeos (MIRZADEH *et al.*, 1992), a transmutação de resíduos radioativos de longa vida (SEGEV *et al.*, 1966), evolução de estrelas (MATHEWS, WARD, 1985), interação de Muons (GULA, 1985) e o cálculo do calor de decaimento do combustível nuclear (GROSSMAN, STEIN, 1978).

No contexto da análise dos reatores nucleares, as equações que descrevem o comportamento temporal das concentrações isotópicas dos nuclídeos que compõem o combustível nuclear, os produtos de fissão e os venenos queimáveis, no núcleo do reator, são chamadas de equações de depleção isotópicas. Essas equações são relevantes 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.

O combustível nuclear não é consumido uniformemente no reator em operação, nem os isótopos fissionáveis são convertidos uniformemente, exceto em raros casos onde a densidade de potência é uniforme ao longo de algumas partes do reator. Como consequência, as equações diferenciais que descrevem as concentrações dos isótopos físeis, em geral, serão funções do tempo e do espaço (LAMARSH, 2001).

Neste capítulo, abordaremos as equações que determinam as concentrações isotópicas dos nuclídeos presentes no núcleo do reator, e também falaremos sobre algumas aproximações utilizadas para lidar com a parte espacial, temporal e energética da mesma.

## 2.2 Definições

Um nêutron em um meio hospedeiro qualquer é caracterizado pelas seguintes variáveis do espaço de fase:  $\vec{r}$  (posição),  $E$  (energia) e  $\hat{\Omega}$  (a direção em que se movimentam); no instante  $t$  de observação. Então, o número esperado de nêutrons que se movimentam com energia  $E$ , dentro do intervalo  $dE$ , na direção  $\hat{\Omega}$ , dentro de um cone de direções  $d\hat{\Omega}$ , em um elemento de volume  $d^3r$ , que se encontra em torno do ponto  $\vec{r}$ , no instante  $t$  é dado por:

$$n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d^3r dE d\hat{\Omega} . \quad (2.1)$$

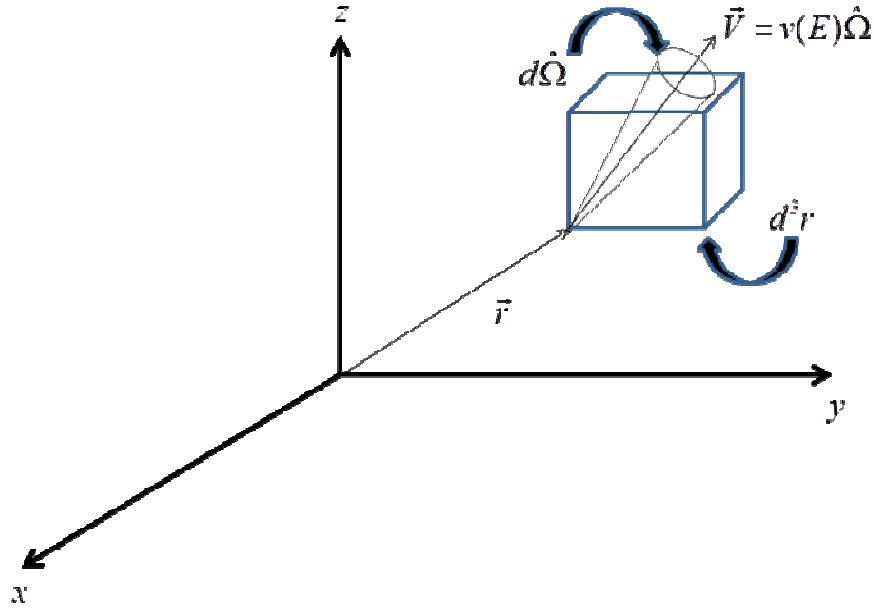


Figura 2.1: Variáveis posição ( $\vec{r}$ ), energia ( $E$ ) e direção ( $\hat{\Omega}$ ) caracterizando um nêutron.

Podemos definir o fluxo angular de nêutrons como sendo o produto do módulo do vetor velocidade  $v(E)$  pela densidade angular de nêutrons  $n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ , ou seja,

$$\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \equiv v(E) n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) . \quad (2.2)$$

Sendo assim, podemos agora definir o fluxo escalar de nêutrons  $\phi(\vec{r}, E, t)$ , ou simplesmente fluxo de nêutrons, da seguinte forma (DUDERSTADT, 1975):

$$\phi(\vec{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \varphi(\vec{r}, E, \theta, \varphi, t) d\theta d\varphi. \quad (2.3)$$

A probabilidade de ocorrer uma reação nêutron-núcleo no reator é caracterizada por uma quantidade chamada seção de choque microscópica. Portanto, se o núcleo alvo possui uma área de seção transversal total  $S$ , que se encontra uniformemente exposta a um feixe de nêutrons, então (DUDERSTADT, 1975):

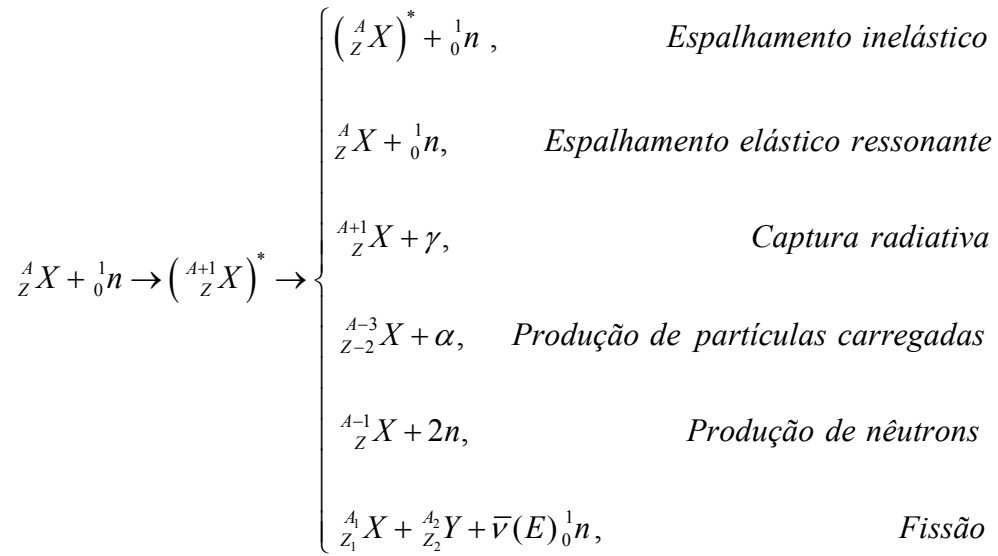
$$\frac{\sigma}{S} \equiv \text{Probabilidade por núcleo que um nêutron do feixe} \\ \text{interaja com o núcleo}$$

Pela expressão acima, podemos dizer que a seção de choque microscópica  $\sigma$  nada mais é que a área “virtual” da seção transversal do núcleo. A seção de choque microscópica é expressa em unidades de área, *barns*, onde 1 barn é igual a  $10^{-24} \text{ cm}^2$ .

Dentro do núcleo do reator, existem diversas maneiras de os nêutrons interagirem com os núcleos, sendo a forma mais simples de reação nuclear que pode ocorrer chamada de *espalhamento potencial*, no qual o nêutron é espalhado elasticamente de um potencial nuclear sem haver a penetração no núcleo em si. A seção de choque para esse tipo de reação é essencialmente a área da seção geométrica do núcleo.

Outra forma comum de reação é aquela em que o nêutron incidente é primeiro absorvido pelo núcleo  ${}^A_ZX$  para criar um novo núcleo composto  ${}^{A+1}_ZX$ . Posteriormente, esse núcleo composto irá decair através da emissão de uma partícula energética e/ou radiação. A formação de um núcleo composto corresponde à conhecida reação de ressonância, na qual a energia de ligação do nêutron incidente adicionada à energia do centro de massa da reação se iguala a um dos níveis de energia do núcleo composto (DUDERSTADT, 1975).

O segundo estágio do processo de um núcleo composto é o seu decaimento. O decaimento pode ocorrer através de inúmeras formas, como indicado abaixo:



onde  $\bar{\nu}(E)$  é o número médio de nêutrons liberados por fissão, que é uma função dependente da energia  $E$  do nêutron incidente. De forma breve, vamos descrever as formas vistas acima com que os nêutrons podem interagir com um núcleo, através da formação do núcleo composto (LAMARSH, 2001):

- a) *Espalhamento inelástico*: Nesse processo, o nêutron inicialmente é absorvido pelo núcleo para formar um núcleo composto no estado excitado. Após, o núcleo irá decair por meio da emissão de um nêutron  $n$ . Contudo, o núcleo final permanece em um estado excitado. Na notação das reações nucleares, essa interação é abreviada pelo símbolo  $(n, n')$ . O decaimento do núcleo excitado resultante se dará por meio da emissão de raios gama.
- b) *Espalhamento elástico ressonante*: Aqui, após o nêutron ser absorvido pelo núcleo, ocorre a emissão de um nêutron e o núcleo alvo retorna ao seu estado inicial de energia. Em contraste com o espalhamento inelástico, a energia cinética é conservada em eventos elásticos. O nêutron, nesse caso, é dito ter sido espalhado elasticamente pelo núcleo. O espalhamento elástico ressonante é denotado pelo símbolo  $(n, n)$ .



- c) *Captura radiativa*: O nêutron incidente é absorvido para formar o núcleo composto de massa  $A + 1$  no estado excitado, e então esse núcleo posteriormente decai através da emissão de um ou mais raios gama, denotado pelo símbolo  $\gamma$ . Esse tipo de reação é denotado por  $(n, \gamma)$ .
- d) *Reações com produção de partículas carregadas*: Nêutrons também podem desaparecer como resultado de reações de absorção do tipo  $(n, \alpha)$  e  $(n, p)$ , onde após a absorção de um nêutron o núcleo no estado excitado emite uma partícula carregada, podendo ser uma partícula alfa ( $\alpha$ ) ou um próton ( $p$ ).
- e) *Reações com produção de nêutrons*: Reações do tipo  $(n, 2n)$  e  $(n, 3n)$  ocorrem com nêutrons com alta energia. A reação  $(n, 2n)$  é especialmente importante em reatores contendo água pesada ou berílio, uma vez que o  $^2\text{H}$  e o  $^9\text{Be}$  possuem nêutrons pouco ligados que podem ser facilmente expelidos.
- f) *Fissão*: Nesse processo, assim como os outros, um núcleo composto é primeiramente formado pela absorção de um nêutron. Esse núcleo composto no estado excitado então decai através da fissão (divisão) em dois núcleos mais leves, chamados de produtos de fissão, além da liberação de 2 a 3 nêutrons e energia.

Cada um dos processos descritos acima, nos quais os nêutrons interagem com o núcleo, pode ser associado à uma seção de choque microscópica característica. Assim, o espalhamento elástico ressonante é descrito pela seção de choque elástica,  $\sigma_e$ ; o espalhamento inelástico pela seção de choque inelástica,  $\sigma_{in}$ ; a reação  $(n, \gamma)$  pela seção de choque de captura,  $\sigma_{n, \gamma}$ ; a fissão pela seção de choque de fissão,  $\sigma_f$ ; a reação com produção de nêutrons por  $\sigma_{n, 2n}$ , e assim por diante. A soma das seções de choque para todas as interações possíveis é chamada de seção de choque total e é denotada pelo símbolo  $\sigma_t$ :

$$\sigma_t = \sigma_e + \sigma_{in} + \sigma_{n,\gamma} + \sigma_f + \sigma_{n,2n} + \sigma_{n,\alpha} + \dots \quad (2.4)$$

Na expressão acima podemos definir a seção de choque de absorção como:

$$\sigma_a \equiv +\sigma_{n,\gamma} + \sigma_f + \sigma_{n,2n} + \sigma_{n,\alpha} + \dots \quad (2.5)$$

Podemos também definir a seção de choque microscópica de espalhamento:

$$\sigma_s = \sigma_e + \sigma_{in} \quad (2.6)$$

Assim, podemos reescrever a equação (2.4) da seguinte forma:

$$\sigma_t = \sigma_s + \sigma_a \quad (2.7)$$

A seção de choque macroscópica  $\Sigma_i(\vec{r}, E, t)$  pode ser interpretada como a probabilidade, por unidade de caminho viajado, que um nêutron com energia  $E$  irá interagir com o núcleo do isótopo  $i$ . A seção de choque macroscópica está relacionada com a seção de choque microscópica através da relação

$$\Sigma_X^i(\vec{r}, E, t) = N_i(\vec{r}, t) \sigma_X^i(E) \quad , \quad (2.8)$$

onde  $N_i(\vec{r}, t)$  é a concentração isotópica do nuclídeo  $i$ , que consiste no número de átomos do nuclídeo  $i$  por unidade de volume, no instante  $t$ .

## 2.3 Obtenção das equações de depleção

As equações de depleção descrevem as taxas de mudança na concentração isotópica  $N_i(\vec{r}, t)$  do nuclídeo  $i$ , e podem ser escritas de maneira qualitativa da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) = \text{Taxa de ganhos} - \text{Taxa de perdas} . \quad (2.9)$$

A taxa de ganhos e perdas do número de átomos de um nuclídeo, existente em um reator nuclear, em um determinado volume, pode ser considerada como sendo composta pelas seguintes parcelas:

1. Termo de absorção
2. Termo de decaimento

Nas próximas subseções falaremos sucintamente sobre a composição dos termos descritos acima que contribuem para os mecanismos de perdas e ganhos dados pela equação (2.9).

### 2.3.1. Termo de absorção

Uma reação de fissão é caracterizada por uma reação na qual um isótopo é fissionado, dando origem a produtos de fissão com menor massa. Para o nuclídeo fissionável  $i$ , a taxa de perda dada pela reação de fissão será:

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{fissão}} = -\Gamma_i^j N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_f^j(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE - {}^* \Gamma_i^j \lambda_f^j N_i(\vec{r}, t), \quad (2.10)$$

onde o primeiro termo do lado direito da equação é a fissão devido à captura de nêutrons do nuclídeo com uma seção de choque microscópica de fissão  $\sigma_f^j(E)$ . O segundo termo representa a fissão espontânea do nuclídeo que possui uma constante de decaimento de fissão  $\lambda_f^j$ , onde  $\lambda_f^j = \ln 2 / T_{1/2}^j$ , com  $T_{1/2}^j$  sendo a meia-vida do nuclídeo para fissão espontânea. Além disso,  $\Gamma_i^j$  representa o número médio de nuclídeos  $j$  criados, devido à fissão do nuclídeo  $i$  por meio da captura de nêutrons e  ${}^* \Gamma_i^j$  representa o número médio de nuclídeos  $j$  criados, devido à fissão espontânea do nuclídeo  $i$ .

Considerando a contribuição positiva, por meio da fissão, para um determinado nuclídeo, podemos escrever

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_j(\vec{r}, t) \right|_{\text{fissão}} = \Gamma_i^j N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_f^j(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE + {}^* \Gamma_i^j \lambda_f^j N_i(\vec{r}, t). \quad (2.11)$$

Todos os isótopos fissionáveis são actínídeos, elementos radioativos com números atômicos entre 89 (actínio) e 103 (laurêncio), que possuem uma massa atômica maior que os produtos de fissão. Assim, torna-se possível dividir todos os isótopos em 2 grupos, os actínídeos e os produtos de fissão.

Olhando agora para o fenômeno da reação de captura radiativa, um nuclídeo  $i$  captura um nêutron formando um isótopo filho  $j$ . A exceção a esse caso é a reação de fissão, onde dois isótopos filhos são formados para cada nêutron capturado. A taxa de perda do nuclídeo  $i$  pode ser escrita como

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{captura}} = -N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{n,\gamma}^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE. \quad (2.12)$$

Seguindo um raciocínio análogo, a taxa de ganho do isótopo filho  $j$ , oriundo da reação de captura ocorrida no nuclídeo  $i$  será

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_j(\vec{r}, t) \right|_{\text{captura}} = N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{n,\gamma}^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE. \quad (2.13)$$

Exceto pela fissão, existe apenas uma pequena diferença entre o número de massa do nuclídeo  $i$  e seu filho  $j$  em todas as reações de absorção e reações de decaimento radioativo.

Considerando as reações que produzem nêutrons e as reações que produzem partículas carregadas, podemos escrever a taxa de perda do nuclídeo  $i$  decorrente de tais reações, como sendo

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{(n,2n)} = -N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{(n,2n)}^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \quad (2.14)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{(n,\alpha)} = -N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{(n,\alpha)}^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE. \quad (2.15)$$

Utilizando a mesma ideia, as taxas de ganho do nuclídeo filho  $j$  decorrente das reações e proveniente do nuclídeo  $i$  serão dadas por

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_j(\vec{r}, t) \right|_{(n,2n)} = N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{(n,2n)}^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \quad (2.16)$$

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_j(\vec{r}, t) \right|_{(n,\alpha)} = N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{(n,\alpha)}^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE. \quad (2.17)$$

Convém ressaltar que, embora um número muito grande de reações seja possível, a maioria dos núclídeos apresenta somente um ou dois tipos de reações de absorção neutrônica.

Com essas breves considerações, podemos então definir o termo de absorção do núclídeo  $i$  como sendo

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{absorção}} &= \left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{fissão}} + \left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{captura}} + \left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{(n,2n)} + \\ &+ \left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{(n,\alpha)} = \\ &= -N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} [\Gamma_i^j \sigma_f^i(E) + \sigma_{n,\gamma}^i(E) + \sigma_{n,2n}^i(E) + \sigma_{n,\alpha}^i(E)] \phi(\vec{r}, E, t) dE \\ &+ N_j(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} [\Gamma_j^i \sigma_f^j(E) + \sigma_{n,\gamma}^j(E) + \sigma_{n,2n}^j(E) + \sigma_{n,\alpha}^j(E)] \phi(\vec{r}, E, t) dE \\ &- {}^* \Gamma_i^j \lambda_f^i N_i(\vec{r}, t) + {}^* \Gamma_j^i \lambda_f^j N_j(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (2.18)$$

### 2.3.2 Termo de decaimento

Alguns núclídeos são naturalmente instáveis, ou radioativos, e decaem em outros núclídeos ao longo do tempo. O produto pode continuar instável, causando outro decaimento e assim por diante, criando uma cadeia de decaimento. Alguns núclídeos podem sofrer diferentes tipos de decaimento levando a diferentes núclídeos filhos (PUSA, 2013). Devido à instabilidade observada em muitos produtos de fissão, as reações de decaimento são todas possíveis dentro de um reator nuclear (FORREST, 1997).

Os tipos de decaimentos radioativos mais comuns são:

- a) Decaimento alfa:  ${}_Z^A X \rightarrow {}_{Z-2}^{A-4} X + {}_2^4 He$
- b) Decaimento beta:  ${}_Z^A X \rightarrow {}_{Z+1}^A X + \beta^-$  ou  ${}_Z^A X \rightarrow {}_{Z-1}^A X + \beta^+$
- c) Decaimento de nêutrons:  ${}_Z^A X \rightarrow {}_Z^{A-1} X + n$

d) Decaimento gama:  ${}^A_Z X^* \rightarrow {}^A_Z X + \gamma$

onde  ${}^A_Z X^*$  representa o estado excitado do nuclídeo  ${}^A_Z X$ .

Os diferentes modos de decaimento podem ser caracterizados de acordo com o nuclídeo e as constantes de decaimento parciais  $\lambda_{i,k}$ , que resultam na taxa volumétrica de decaimento do tipo  $k(\alpha, \beta, \gamma, n)$  do nuclídeo  $i$  como (PUSA, 2013)

$$T_{i,k}(\vec{r}, t) = \lambda_{i,k} N_i(\vec{r}, t), \quad (2.19)$$

onde  $N_i$  é a concentração isotópica do nuclídeo  $i$ , no instante  $t$ . Como as constantes de decaimento são aditivas, em virtude da probabilidade, por unidade de tempo, de um dado nuclídeo decair por diferentes tipos de radiação, a taxa total de decaimento é dada pela constante de decaimento total  $\lambda_i = \sum_k \lambda_{i,k}$ . Normalmente a constante de decaimento total, chamada simplesmente de constante de decaimento, é usada em vez das constantes de decaimento parciais. Além disso, podemos definir constantes adicionais  $c_{i,k} = \lambda_{i,k}/\lambda_i$ , chamadas de razões de ramificação, que são utilizadas para especificar as frações relativas dos diferentes decaimentos dados por (PUSA, 2013)

$$T_{i,k}(\vec{r}, t) = c_{i,k} \lambda_i N_i(\vec{r}, t). \quad (2.20)$$

As razões de ramificação podem ser generalizadas entre quaisquer outros dois nuclídeos  $i$  e  $j$  como a fração de decaimentos do nuclídeo  $j$  que produz o nuclídeo  $i$ . Definindo esta razão como

$$c_{i,k,j} = \lambda_{i,k,j} / \lambda_j, \quad (2.21)$$

a taxa à qual o nuclídeo  $i$  é produzido pelo decaimento do nuclídeo  $j$  será dada por (PUSA, 2013)

$$T_{i,k,j}(\vec{r}, t) = c_{i,k,j} \lambda_j N_j(\vec{r}, t). \quad (2.22)$$

Sendo assim, podemos definir o termo de decaimento da seguinte forma

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{decaimento}} = -T_{i,k}(\vec{r}, t) + \sum_{j \neq i} T_{i,k,j}(\vec{r}, t). \quad (2.19)$$

Enquanto os decaimentos sempre caminham na direção de estados menos energéticos, isto é, tendendo à estabilidade, as reações de transmutação também podem levar a estados mais energéticos, devido às energias cinéticas e de ligação da partícula incidente. Combinando sequencialmente as reações de decaimento e de transmutação, qualquer nuclídeo pode, em teoria, resultar em qualquer outro nuclídeo, embora essa possibilidade precise de um número não realístico de reações improváveis. Isso resulta em uma cadeia de decaimentos e reações de transmutação, chamada de cadeia de depleção (PUSA, 2013).

### 2.3.4 As equações para os actínídeos e os produtos de fissão

Combinando os termos de absorção e decaimento, ou seja, as equações (2.18) e (2.23), podemos reescrever a equação (2.8) como

$$\frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) = \left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{absorção}} + \left. \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) \right|_{\text{decaimento}}. \quad (2.20)$$

Particularizando a equação acima para um actínídeo inserido em uma cadeia de depleção com  $N$  termos, podemos reescrever a equação (2.24) (HENRY, 1986):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) = & -N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_a^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE - T_{i,k}(\vec{r}, t) \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{I_f} \left[ N_j(\vec{r}, t) \Upsilon_{ij} \int_0^{\infty} \sigma_X^j(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE + T_{i,k,j}(\vec{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (2.21)$$

onde  $X$  representa as possíveis reações de  $(n, \gamma)$ ,  $(n, 2n)$  e  $(n, \alpha)$  do nuclídeo  $j$  que originam o nuclídeo  $i$ ,  $I_f$  representa o número total de nuclídeos na cadeia, e  $\Upsilon_{ij}$  é dado por

$$\Upsilon_{ij} \equiv \begin{cases} \tau_{ij}, & \text{para } X = (n, \gamma) \\ 1, & \text{para } X = (n, \alpha), \\ 1, & \text{para } X = (n, 2n) \end{cases}$$

onde  $\tau_{ij}$  representa o percentual com que o nuclídeo  $i$  é produzido por captura radiativa do nuclídeo  $j$ . Note que a equação (2.25) é não linear e heterogênea, uma vez que para determinarmos as concentrações isotópicas, precisamos conhecer o fluxo de nêutrons. Porém, o mesmo não possui apenas uma dependência espacial e temporal, mas depende também das próprias concentrações isotópicas. O problema da não-linearidade pode ser contornado usando a chamada Aproximação Quase-Estática (OTT, MENELEY, 1969; DEVOOGHT, 1980; DEVOOGHT, MUND, 1980; DULLA *et al.*, 2008; GOLUOGLU, DODDS, 2001). Na seção 2.4 abordamos melhor essa questão.

Considerando que os nuclídeos a serem monitorados no reator dependerão do combustível particular utilizado no núcleo, a Figura 2.2 (SEKIMOTO, 2007) mostra, apenas como ilustração, a cadeia de alguns actínídeos de interesse geralmente considerados em reatores cujo combustível é o urânio e o plutônio.





$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} N_{237U}(\vec{r}, t) = & + N_{236U}(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{n,\gamma}^{236U}(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \\
& + N_{238U}(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{n,2n}^{238U}(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \\
& - \lambda_{237U} N_{237U}(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{2.22}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} N_{238U}(\vec{r}, t) = & - N_{238U}(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{n,\gamma}^{238U}(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \\
& - N_{238U}(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{n,2n}^{238U}(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \\
& - \lambda_{238U} N_{238U}(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{2.23}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} N_{239U}(\vec{r}, t) = & + N_{238U}(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_{n,\gamma}^{238U}(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \\
& - \lambda_{239U} N_{239U}(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{2.24}$$

À medida que o combustível nuclear vai sendo queimado, as inúmeras fissões que ocorrem no núcleo produzem diversos pares de fragmentos de fissão. Uma reação típica de fissão pode ser vista abaixo:



A influência dos produtos de fissão acumulados no núcleo do reator é dada, basicamente, por duas razões. Primeiro, 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, gerando fontes de calor de longa duração. Segundo, 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. Essas altas absorções neutrônicas podem afetar de maneira significativa o fator de multiplicação, interferindo na operação do reator.

Para ilustrar a importância desse fenômeno, vamos fazer uma simples estimativa da mudança na reatividade no núcleo, causada pelo acúmulo dos produtos de fissão. Inicialmente, cabe ressaltar que uma vez que nem todos os nêutrons são absorvidos pelo combustível, podemos definir o fator de utilização térmica  $f$  como a probabilidade de

um nêutron térmico ser absorvido pelo combustível (C) e não por um “não-combustível” (NC), por exemplo, o moderador ou o revestimento da pastilha. Equivalentemente,  $f$  é a razão entre a taxa de absorção média de nêutrons térmicos no combustível e a taxa de absorção total dos nêutrons no combustível e no não-combustível. Matematicamente (LEWIS, 2008):

$$f = \frac{\sum_a^C \bar{\phi}^C V^C}{\sum_a^C \bar{\phi}^C V^C + \sum_a^{NC} \bar{\phi}^{NC} V^{NC}} = \frac{\sum_a^C}{\sum_a^C + \sum_a^{NC} (V^{NC}/V^C) (\bar{\phi}^{NC}/\bar{\phi}^C)} \quad (2.26)$$

onde  $\bar{\phi}^C$  e  $\bar{\phi}^{NC}$  são os fluxos médios térmicos no combustível (de volume  $V^C$ ) e no não-combustível (com volume  $V^{NC}$ ), respectivamente. Para um reator homogêneo  $\bar{\phi}^C = \bar{\phi}^{NC}$  e  $V^C = V^{NC}$  tal que:

$$f = \frac{\sum_a^C}{\sum_a^C + \sum_a^{NC}} \quad (2.27)$$

O valor de  $f$  pode variar de próximo do valor zero, para um mistura de combustível muito diluída, até o valor 1 (um), para um núcleo composto somente por combustível.

A mudança na reatividade  $\Delta\rho$  introduzida pelo produto de fissão pode ser escrita como

$$\Delta\rho = \frac{k'_{ef} - 1}{k'_{ef}} - \frac{k_{ef} - 1}{k_{ef}}, \quad (2.28)$$

onde  $k'_{ef}$  é o fator de multiplicação efetivo que indica o núcleo com o produto de fissão incluso e  $k_{ef}$  se refere ao mesmo núcleo sem o produto de fissão. Um dos efeitos dos produtos de fissão na operação do reator é a diminuição do fator de utilização térmica. Considerando esse efeito, podemos relacionar os fatores de multiplicação da seguinte forma

$$k'_{ef} = \frac{k_{ef} f'}{f}. \quad (2.29)$$

Assumindo que o núcleo sem o produto de fissão está crítico ( $k_{ef} = 1$ ), e substituindo a equação (2.33) em (2.32):

$$\Delta\rho = \frac{k'_{ef}-1}{k'_{ef}} = 1 - \frac{1}{k'_{ef}} = 1 - \frac{f}{f'k'_{ef}} = 1 - \frac{f}{f'} \quad (2.30)$$

ou seja,

$$\Delta\rho = 1 - \frac{\sum_a^C / \sum_a}{\sum_a^C / (\sum_a + \sum_a^{PF})} = -\frac{\sum_a^{PF}}{\sum_a} = -\frac{\sigma_a^{PF} N_{PF}}{\sum_a} \quad (2.31)$$

onde  $\sum_a = \sum_a^C + \sum_a^{NC}$ . Sendo assim, para determinarmos o transiente de reatividade causado por um particular produto de fissão, precisamos conhecer a sua concentração isotópica  $N_{PF}$ , através das equações de depleção que caracterizam tal grandeza.

Utilizando as equações de balanço, assim como fizemos para os actínídeos, podemos escrever uma expressão geral para a taxa de criação de um produto de fissão genérico  $i$ , sendo gerado a partir de uma cadeia onde existam  $I_f$  actínídeos, utilizando a equação (2.9), como (HENRY, 1986):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) = & \sum_{j=1}^{I_f} \Gamma_j^i N_j(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_f^j(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE + {}^* \Gamma_j^i \lambda_j^i N_j(\vec{r}, t) \\ & + \sum_{\substack{j=I_f+1 \\ j \neq i}}^{I_{total}} T_{i,k,j}(\vec{r}, t) - T_{i,k}(\vec{r}, t) - N_i(\vec{r}, t) \int_0^{\infty} \sigma_a^j(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde  $i = I_f + 1, I_{total}$ , sendo  $I_{total}$  o número total de núclídeos considerados (actínídeos e produtos de fissão).

Existem centenas de produtos de fissão e respectivos filhos decorrentes dos seus decaimentos que são criados ao longo do tempo, cada qual com seções de choque microscópicas de absorção diferentes para nêutrons térmicos. Devido a esse grande número, salvo algumas exceções, fica praticamente inviável tratá-los matematicamente em toda a sua amplitude. Uma estratégia possível para solucionar esse problema é permitir que esses produtos de fissão e seus filhos sejam tratados coletivamente, como se representassem apenas um núclídeo possuindo uma seção de choque de absorção determinada. Apesar dessa simplificação funcionar para cálculos de queima de longos períodos, existem produtos de fissão que, por possuírem altas seções de choque de

absorção, como o  $^{135}\text{Xe}$  e o  $^{149}\text{Sm}$ , merecem ser tratados separadamente em virtude de influenciarem consideravelmente a operação do reator do ponto de vista de criticalidade e controle.

Considerando as equações (2.25) e (2.36), podemos perceber que essas equações possuem uma dependência em três variáveis: espaço, tempo e energia. Analisando o caso particular da dependência energética, uma aproximação comumente utilizada é a formulação multigrupo, onde 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 de energia. Ou seja, o espectro de energia dos nêutrons é dividido em  $G$  grupos de energia contíguos, de acordo com o esquema da Figura 2.3:

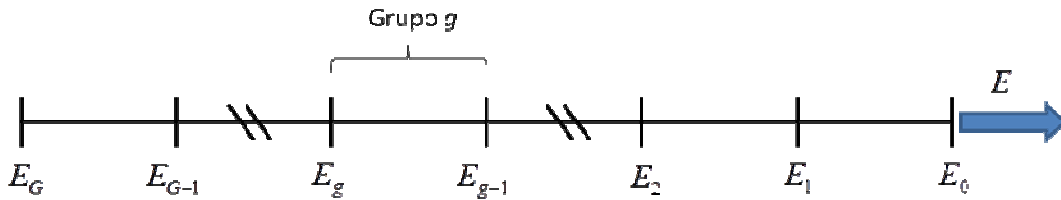


Figura 2.3: Discretização da energia

Por meio da discretização da variável  $E$  em grupos de energia, podemos reescrever a equação (2.25) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) = & -N_i(\vec{r}, t) \sum_{g=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_a^i(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE - T_{i,k}(\vec{r}, t) \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{I_f} \left[ N_j(\vec{r}, t) \gamma_{ij} \sum_{g=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_X^j(E) \phi(\vec{r}, E, t) dE + T_{i,k,j}(\vec{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (2.33)$$

Considerando a dependência da seção de choque com a energia dos nêutrons, poderíamos esperar que pudessem ser necessários vários grupos de energia para descrever adequadamente o comportamento dos reatores nucleares. No entanto, a maioria dos cálculos relacionados ao núcleo do reator, e, portanto dos códigos computacionais que simulam tais núcleos, alcançam uma precisão suficiente utilizando somente poucos grupos de energia. A habilidade de descrever adequadamente o reator com uma quantidade relativamente pequena de grupos de energia é consequência de

uma cuidadosa escolha de seções de choque médias que caracterizam os nêutrons em cada grupo (DUDERSTADT, 1975).

Definindo

$$\Sigma_{Xg}^m(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} N_m(\vec{r}, t) \sigma_X^i(E) \phi_g(\vec{r}, E, t) dE \quad , \quad (2.34)$$

podemos reescrever a equação (2.37) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} N_i(\vec{r}, t) = & - \sum_{g=1}^G \Sigma_{ag}^i(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) - T_{i,k}(\vec{r}, t) \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{I_f} \left[ \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \Sigma_{Xg}^j(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) + T_{i,k,j}(\vec{r}, t) \right] \end{aligned} \quad (2.35)$$

Como podemos ver na equação (2.39), para resolvermos as equações de depleção isotópica, necessitamos conhecer o fluxo de nêutrons. Este, por sua vez, é calculado através das equações de difusão multigrupo estacionárias (esta tarefa também envolverá o acoplamento termo-hidráulico, usando como dados de entrada as seções de choque caracterizando os nuclídeos, e o ajuste do controle necessário para atingir a criticalidade do núcleo) (DUDERSTADT, 1975).

Para o cálculo da distribuição de fluxo de nêutrons durante um período de queima, representado pelo intervalo  $[t_0, t_L]$ , será adotada a aproximação quase-estática. Nesta aproximação o período de queima é dividido em  $L$  intervalos de tempo, chamados de intervalos de queima, nos quais a distribuição de fluxo de nêutrons é mantida constante e igual àquela calculada no final do intervalo anterior. Na Figura 2.5 são mostrados, de forma esquemática, os  $L$  intervalos de queima.

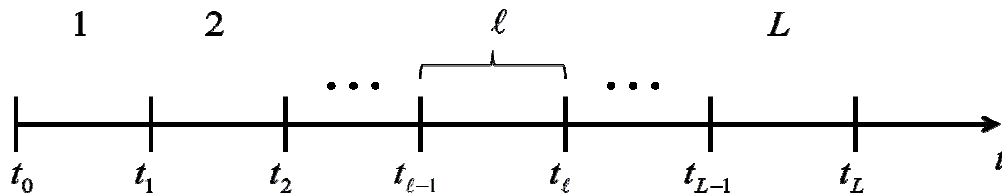


Figura 2.5: Discretização do período de queima

onde:

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

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

Uma dificuldade prática que justifica essa aproximação reside no fato de que, à medida que o combustível vai sendo queimado, as barras de controle inseridas no núcleo são gradualmente retiradas para manter a condição de criticalidade, levando a mudanças na distribuição do fluxo de nêutrons no reator. Portanto, com o intuito de minimizar os efeitos dessa oscilação no fluxo, a utilização de pequenos intervalos de queima é geralmente adequada (ZWEIFEL, 1973).

Em cada um desses intervalos de queima, considerando o fluxo de nêutrons discretizado em grupos de energia teremos, para qualquer instante  $t$  dentro do intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_\ell)$  a seguinte relação:

$$\phi_g(\vec{r}, t) \cong \phi_g(\vec{r}, t_{\ell-1}) \quad ; \quad \text{para } t_{\ell-1} \leq t < t_\ell \quad \text{e } l = 1, 2, 3, \dots, L.$$

A distribuição de fluxo de nêutrons, em um instante  $t_\ell$  qualquer,  $\phi_g(\vec{r}, t_\ell)$ , para  $\ell = 0, 1, 2, 3, \dots, L$  é obtida resolvendo-se a equação da difusão de nêutrons no estado estacionário, com os parâmetros nucleares (coeficiente de difusão e seções de choque) do instante  $t_\ell$ . Com esta aproximação, será possível calcularmos o fluxo de nêutrons utilizando o método nodal, descrito a seguir.

## 2.4 Método Nodal

Na década de 70, iniciou-se um grande progresso no desenvolvimento de métodos nodais de malha grossa para resolver numericamente a equação de difusão de nêutrons multigrupo. Esses métodos foram capazes, através da discretização do domínio espacial do núcleo do reator heterogêneo em regiões homogêneas, de calcular o autovalor e o fluxo de nêutrons médio no nodo com grande precisão, assim como a distribuição de potência no núcleo do reator, considerando o nodo do tamanho do elemento combustível. Os resultados obtidos foram comparados a partir do cálculo de referência

(geralmente, cálculo de malha fina) (PESSOA, 2014) Na literatura podemos encontrar alguns métodos de discretização espacial mas, em virtude da utilização neste trabalho, destacaremos o Método de Expansão Nodal (FINEMANN *et al.*, 1977), que utiliza a equação da difusão integrada transversalmente, gerando um conjunto de três equações “unidimensionais” acopladas pelos termos de fuga transversal, cuja solução fornece uma relação entre os fluxos médios e as correntes líquidas médias nas faces do nodo. Métodos muito utilizados para o cálculo nodal de malha grossa, também são encontrados na literatura como o de diferenças finitas de malha grossa (MARTINEZ, SILVA, 2003) inicialmente proposto por ARAGONES (1986). Esses métodos que usam diferenças finitas têm como principal objetivo a redução do tempo de processamento quando comparados com o método NEM. Outro importante método que usa expansões polinomiais para o termo de fonte e de espalhamento é conhecido como semi-analítico (KIM, YEONG-IL *et al.*, 1999).

Para obter a solução numérica da equação da difusão de nêutrons no estado estacionário será usado o Método de Expansão Nodal (NEM) de quarta ordem com fuga quadrática e um método de Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG) para acelerar a convergência do esquema iterativo resultante.

No NEM o domínio espacial do núcleo do reator é dividido em paralelepípedos contíguos chamados nodos. E como o NEM exige que os nodos sejam homogêneos, são adotados modelos especiais para tratar as seções de choque que deixam de ser uniformes, no interior do nodo, devido à queima e à movimentação de barras de controle. Com estes modelos especiais os nodos permanecem homogêneos e a nodalização do núcleo, que foi previamente estabelecida, é mantida.

#### 2.4.1 Equação de Balanço Nodal

O método NEM tem seu ponto de partida na equação da continuidade de nêutrons e na Lei de Fick que, para geometria cartesiana, estado estacionário, no instante  $t_\ell$ , e com dois grupos de energia  $g = 1, 2$ , são respectivamente:



$$\begin{aligned}
& \sum_{u=x,y,z} \frac{\partial}{\partial u} J_{gu}(x, y, z, t_\ell) + [\Sigma_{ag}(x, y, z, t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \Sigma_s^{g \rightarrow g'}(x, y, z, t_\ell)] \phi_g(x, y, z, t_\ell) = \\
& = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{g'}(x, y, z, t_\ell) \phi_{g'}(x, y, z, t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(x, y, z, t_\ell) \phi_{g'}(x, y, z, t_\ell) \quad (2.40)
\end{aligned}$$

e ,

$$\sum_{u=x,y,z} J_{gu}(x, y, z, t_\ell) = -D_g(x, y, z, t_\ell) \frac{\partial}{\partial u} \phi_g(x, y, z, t_\ell), \quad u = x, y, z \quad (2.41)$$

onde:

$J_{gu}(x, y, z, t_\ell) \equiv$  corrente líquida de nêutrons do grupo  $g$ ;

$\Sigma_{ag}(x, y, z, t_\ell) \equiv$  seção de choque macroscópica de absorção do grupo  $g$ ;

$\sum_{g'=1}^2 \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(x, y, z, t_\ell) \equiv$  seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo  $g'$  para o grupo  $g$ ;

$\chi_g \equiv$  espectro de fissão do grupo  $g$ ;

$\nu \Sigma_{fg'}(x, y, z, t_\ell) \equiv$  produto do número médio de nêutrons emitidos na fissão pela seção de choque macroscópica de fissão do grupo  $g'$ ;

$D_g(x, y, z, t_\ell) \equiv$  coeficiente de difusão do grupo  $g$ ;

$k_{eff} \equiv$  fator de multiplicação efetivo

Além disso, o NEM trabalha com correntes parciais, ou seja, as componentes de  $J_g(x, y, z, t_\ell)$  são assim escritas:

$$J_{gu}(x, y, z, t_\ell) = J_{gu}^+(x, y, z, t_\ell) - J_{gu}^-(x, y, z, t_\ell); \quad u = x, y, z \quad (2.42)$$

A equação de balanço nodal, da qual são obtidos os fluxos médios nos nodos  $\bar{\phi}_g^n(t_\ell)$ , resulta da integração da equação (2.40) no volume  $V_n \equiv a_x^n a_y^n a_z^n$  de um nodo  $n$ , mostrado na Figura 2.4, e posterior divisão da equação integrada por este volume, ou seja,

$$\begin{aligned}
& \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} \left( \bar{J}_{gur}^n(t_\ell) - \bar{J}_{gul}^n(t_\ell) \right) + \left[ \Sigma_{ag}^n + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n \right] \bar{\phi}_g^n(t_\ell) = \\
& = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.43)
\end{aligned}$$

onde

$$\bar{\phi}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \phi_g(x, y, z, t_\ell) dV \quad (2.44)$$

$$\bar{J}_{gus}^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} J_{gu}(u_s^n, v, w, t_\ell) dv dw ; \text{ para } u = x, y, z \text{ e } s = r, l \quad , \quad (2.45)$$

com  $u_s^n = 0$  para  $s = l$ , face esquerda do nodo, e  $u_s^n = a_u^n$  para  $s = r$ , face direita do nodo. Além disso

$$\bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(x, y, z, t_\ell) dV \quad , \quad (2.46)$$

e para as seções de choque envolvendo captura e fissão que por causa do gradiente de queima variam espacialmente no interior do nodo,

$$\bar{\Sigma}_{Xg}^n(t_\ell) \bar{\phi}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{Xg}(x, y, z, t_\ell) \phi_g(x, y, z, t_\ell) dV \quad . \quad (2.47)$$

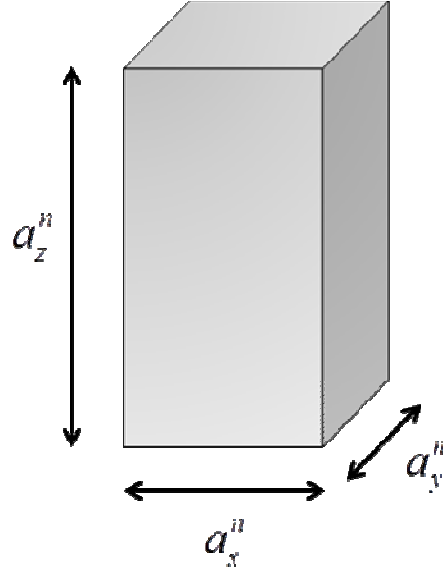


Figura 2.4: Dimensões do nodo n arbitrário

## 2.4.2 Equações de Acoplamento Nodal

As equações de acoplamento nodal, que juntas com a equação (2.43) completariam o sistema de equações para obter fluxos e correntes médios, são obtidas a partir das equações (2.41) e (2.42) com a integração destas equações na área  $A_u^n = a_v^n a_w^n$ , transversal à direção  $u$ , e posterior divisão das equações integradas por esta área, o que resulta em

$$\bar{J}_{gus}^n(t_\ell) = -\bar{D}_g^n(t_\ell) \frac{d}{du} \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \Big|_{u=u_s^n} \quad (2.48)$$

e

$$\bar{J}_{gus}^n(t_\ell) = \bar{J}_{gus}^{+n}(t_\ell) - \bar{J}_{gus}^{-n}(t_\ell); \text{ para } u = x, y, z \text{ e } s = r, l, \quad (2.49)$$

onde:

$$\bar{J}_{gus}^{\pm n}(t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} J_{gu}^{\pm}(u_s^n, v, w, t_\ell) dv dw, \quad (2.50)$$

$$\bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) dv dw \quad (2.51)$$

e

$$\bar{D}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{3\bar{\Sigma}_{vg}^n(t_\ell)} \quad , \quad (2.52)$$

com

$$\bar{\Sigma}_{vg}^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{vg}(x, y, z, t_\ell) dV \quad . \quad (2.53)$$

Segundo o Método NEM, os fluxos unidimensionais  $\bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell)$  são calculados usando uma expansão polinomial do quarto grau da seguinte forma:

$$\bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) = \sum_{k=0}^4 c_{kgu}^n(t_\ell) h_k(u / a_u^n) \quad (2.54)$$

onde os termos  $h_k(\xi)$ , para  $\xi \equiv u / a_u^n$ , são chamados de funções de base do NEM e são assim definidas:

$$h_0(\xi) = 1 \quad (2.55)$$

$$h_1(\xi) = 2\xi - 1 \quad (2.56)$$

$$h_2(\xi) = 6\xi(1 - \xi) - 1 \quad (2.57)$$

$$h_3(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(2\xi - 1) \quad (2.58)$$

$$h_4(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(5\xi^2 - 5\xi + 1) \quad (2.59)$$

Uma vez conhecidas as funções de base  $h_k(u / a_u^n)$  e suas propriedades (FINEMANN *et al.*, 1977), pode-se determinar os coeficientes da expansão conforme veremos adiante.

### 2.4.3 Coeficientes Primários

Para o cálculo do coeficiente de grau zero da equação (2.54) é usada a condição de consistência, qual seja,

$$\bar{\phi}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) du \quad ; \quad \forall u = x, y, z \quad (2.60)$$

Substituindo a equação (2.54) na equação (2.60) e fazendo uso da propriedade das funções de base do NEM, qual seja

$$\int_0^1 h_k(\xi) d\xi = 0 \quad ; \quad \forall k \geq 1 \quad (2.61)$$

e

$$h_k(1) = h_k(0) = 0 \quad ; \quad \forall k \geq 3 \quad , \quad (2.62)$$

chegamos a

$$c_{0gu}^n(t_\ell) = \bar{\phi}_g^n(t_\ell) \quad ; \quad \forall u = x, y, z \quad . \quad (2.63)$$

Para o cálculo dos coeficientes do primeiro e do segundo graus são usadas as condições nas superfícies do nodo, quais sejam,

$$\bar{\psi}_{gu}^n(u_s^n, t_\ell) = \sum_{k=0}^4 c_{kgu}^n(t_\ell) h_k(u_s^n / a_u^n) = \frac{\psi_{gus}^n(t_\ell)}{f_{gus}^n(t_\ell)} \quad ; \quad \text{para } s = r, l \quad , \quad (2.64)$$

onde  $f_{gus}^n(t_\ell)$  são os fatores de descontinuidade nas faces do nodo. Além disso, segundo a aproximação da difusão temos:

$$\psi_{gus}^n(t_\ell) = 2(\bar{J}_{gus}^{+n}(t_\ell) + \bar{J}_{gus}^{-n}(t_\ell)) \quad (2.65)$$

Substituindo as funções de base, para os dois valores de  $u_s^n$ , na equação (2.64) obtém-se um sistema de equações cuja solução resulta em

$$c_{1gu}^n(t_\ell) = \frac{1}{2} (\psi_{gur}^n(t_\ell) / f_{gur}^n(t_\ell) - \psi_{gul}^n(t_\ell) / f_{gul}^n(t_\ell)) \quad (2.66)$$

e

$$c_{2gu}^n(t_\ell) = \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) - \frac{1}{2}(\psi_{gur}^n(t_\ell)/f_{gur}^n(t_\ell) + \psi_{gul}^n(t_\ell)/f_{gul}^n(t_\ell)) \quad . \quad (2.67)$$

## 2.4.4 Coeficientes Secundários

Para o cálculo dos coeficientes do terceiro e do quarto graus é usada a equação da difusão integrada na área  $A_u^n = a_v^n a_w^n$  transversal à direção  $u$  e posterior divisão da equação integrada por esta área, isto é

$$\begin{aligned} -\bar{D}_g^n(t_\ell) \frac{d^2}{du^2} \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) + [\Sigma_{ag}^n(t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n(t_\ell)] \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) = \\ = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \bar{\psi}_{g'u}^n(u, t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \bar{\psi}_{g'u}^n(u, t_\ell) - L_{gu}^n(u, t_\ell) - d_{gu}^n(u, t_\ell) \end{aligned} \quad (2.68)$$

onde

$$\begin{aligned} L_{gu}^n(u, t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \left\{ -\frac{\partial}{\partial v} (D_g(u, v, w, t_\ell)) \frac{\partial}{\partial v} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) \right\} dv dw + \\ + \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \left\{ -\frac{\partial}{\partial w} (D_g(u, v, w, t_\ell)) \frac{\partial}{\partial w} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) \right\} dv dw \quad , \end{aligned} \quad (2.69)$$

$$\begin{aligned} d_{gu}^n(u, t_\ell) \equiv \{ \Sigma_{agu}^n(u, t_\ell) - \Sigma_{ag}^n(t_\ell) \} \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \\ - \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'=1}^2 \{ v \Sigma_{fg'u}^n(u, t_\ell) - v \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \} \bar{\psi}_{g'u}^n(u, t_\ell) \end{aligned} \quad (2.70)$$

e

$$\Sigma_{xgu}^n(u, t_\ell) \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \Sigma_{xg}(u, v, w, t_\ell) \varphi_g(u, v, w, t_\ell) dv dw \quad , \quad (2.71)$$

para as seções de choque envolvendo captura e fissão.

No NEM, tanto a fuga transversal à direção  $u$ ,  $L_{gu}^n(u, t_\ell)$ , quanto a função  $d_{gu}^n(u, t_\ell)$  são representadas por expansões polinomiais da seguinte forma:

$$L_{gu}^n(u, t_\ell) = \sum_{k=0}^2 \alpha_{kgu}^n(t_\ell) h_k(u / a_u^n) \quad (2.72)$$

e

$$d_{gu}^n(u, t_\ell) = \sum_{k=0}^2 \beta_{kgu}^n(t_\ell) h_k(u/a_u^n) \quad . \quad (2.73)$$

Com isso, os coeficientes  $c_{3gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{4gu}^n(t_\ell)$  podem ser calculados a partir da seguinte equação de resíduos ponderados:

$$\begin{aligned} & \int_0^{a_u^n} \omega_i(u/a_u^n) \left\{ -\bar{D}_g^n(t_\ell) \frac{d^2}{du^2} \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) + [\Sigma_{ag}^n(t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n(t_\ell)] \bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell) - \right. \\ & - \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \bar{\psi}_{g'u}^n(u, t_\ell) - \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \bar{\psi}_{g'u}^n(u, t_\ell) + \\ & \left. + L_{gu}^n(u, t_\ell) + d_{gu}^n(u, t_\ell) \right\} du = 0 \quad , \quad (2.74) \end{aligned}$$

onde as funções de peso  $\omega_i(u/a_u^n)$  são escolhidas como sendo  $h_1(u/a_u^n)$  e  $h_2(u/a_u^n)$  para calcular  $c_{3gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{4gu}^n(t_\ell)$ , respectivamente.

Substituindo as equações (2.54), (2.72) e (2.73) na equação (2.74) e utilizando algumas definições para  $h_1(u/a_u^n)$  e  $h_2(u/a_u^n)$ , obtemos os seguintes sistemas de equações a partir dos quais os coeficientes secunários são, respectivamente, calculados:

$$\begin{aligned} & \{12\bar{D}_g^n(t_\ell)/(a_u^n)^2 + \frac{1}{5}[\Sigma_{ag}^n(t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n(t_\ell)]\} c_{3gu}^n(t_\ell) - \\ & - \frac{1}{5} \sum_{g'=1}^2 \left\{ \frac{1}{k_{eff}} \chi_g v \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right\} c_{3g'u}^n(t_\ell) = -\frac{1}{3} \{ \alpha_{1gu}^n(t_\ell) + \beta_{1gu}^n(t_\ell) \} - \\ & - \frac{1}{3} \{ [\Sigma_{ag}^n(t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n(t_\ell)] c_{1gu}^n(t_\ell) - \sum_{g'=1}^2 \left[ \frac{1}{k_{eff}} \chi_g v \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right] c_{1g'u}^n(t_\ell) \} \quad (2.75) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} & \{12\bar{D}_g^n(t_\ell)/(a_u^n)^2 + \frac{3}{35}[\Sigma_{ag}^n(t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n(t_\ell)]\} c_{4gu}^n(t_\ell) - \\ & - \frac{3}{35} \sum_{g'=1}^2 \left\{ \frac{1}{k_{eff}} \chi_g v \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right\} c_{4g'u}^n(t_\ell) = \frac{1}{5} \{ \alpha_{2gu}^n(t_\ell) + \beta_{2gu}^n(t_\ell) \} - \\ & - \frac{1}{5} \{ [\Sigma_{ag}^n(t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n(t_\ell)] c_{2gu}^n(t_\ell) - \sum_{g'=1}^2 \left[ \frac{1}{k_{eff}} \chi_g v \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right] c_{2g'u}^n(t_\ell) \} \quad (2.76) \end{aligned}$$

## 2.4.5 Correntes Parciais de Saída

Agora que se tem como calcular todos os coeficientes da expansão de  $\bar{\psi}_{gu}^n(u, t_\ell)$ , é possível obter as correntes parciais de saída do nodo e completar o acoplamento nodal. Substituindo a expansão dada pela equação (2.54) na equação (2.49) e fazendo uso das definições dos coeficientes primários, obtêm-se as correntes parciais de saída, que aparecem como

$$\begin{aligned} \bar{J}_{gul}^{-n}(t_\ell) = & A_{0gul}^n(t_\ell)\{\bar{\phi}_g^n(t_\ell) + c_{4gu}^n(t_\ell)\} + A_{1gul}^n(t_\ell)\bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) + \\ & + A_{2gul}^n(t_\ell)\bar{J}_{gur}^{-n}(t_\ell) - A_{3gul}^n(t_\ell)c_{3gu}^n(t_\ell) \end{aligned} \quad (2.77)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{J}_{gur}^{+n}(t_\ell) = & A_{0gur}^n(t_\ell)\{\bar{\phi}_g^n(t_\ell) + c_{4gu}^n(t_\ell)\} + A_{2gur}^n(t_\ell)\bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) + \\ & + A_{1gur}^n(t_\ell)\bar{J}_{gur}^{-n}(t_\ell) + A_{3gur}^n(t_\ell)c_{3gu}^n(t_\ell) \quad , \end{aligned} \quad (2.78)$$

onde

$$A_{0gul}^n(t_\ell) \equiv 6D_{gu}^n(t_\ell)\{1 + 4D_{gur}^n(t_\ell)\} / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.79)$$

$$A_{1gul}^n(t_\ell) \equiv \{1 + 8[D_{gur}^n(t_\ell) - D_{gul}^n(t_\ell)] - 48D_{gul}^n(t_\ell)D_{gur}^n(t_\ell)\} / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.80)$$

$$A_{2gul}^n(t_\ell) \equiv -8D_{gur}^n(t_\ell) / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.81)$$

$$A_{3gul}^n(t_\ell) \equiv 6D_{gu}^n(t_\ell)\{1 + 12D_{gur}^n(t_\ell)\} / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.82)$$

$$A_{0gur}^n(t_\ell) \equiv 6D_{gu}^n(t_\ell)\{1 + 4D_{gul}^n(t_\ell)\} / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.83)$$

$$A_{1gur}^n(t_\ell) \equiv \{1 - 8[D_{gur}^n(t_\ell) - D_{gul}^n(t_\ell)] - 48D_{gul}^n(t_\ell)D_{gur}^n(t_\ell)\} / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.84)$$

$$A_{2gur}^n(t_\ell) \equiv -8D_{gul}^n(t_\ell) / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad (2.85)$$

e

$$A_{3gur}^n(t_\ell) \equiv 6D_{gu}^n(t_\ell)\{1 + 12D_{gul}^n(t_\ell)\} / DET_{gu}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.86)$$

com

$$DET_{gu}^n(t_\ell) \equiv 1 + 8\{D_{gur}^n(t_\ell) + D_{gul}^n(t_\ell)\} + 48D_{gul}^n(t_\ell)D_{gur}^n(t_\ell) \quad , \quad (2.87)$$



$$D_{gu}^n(t_\ell) \equiv \bar{D}_g^n(t_\ell) / a_u^n \quad (2.88)$$

e

$$D_{gus}^n(t_\ell) \equiv D_{gu}^n(t_\ell) / f_{gus}^n(t_\ell) \quad ; \quad \text{para } s = r, l \quad . \quad (2.89)$$

## 2.4.6 Equação para o Fluxo médio

Substituindo as equações (2.77) e (2.78) na equação (2.49), para  $s = l$  e  $s = r$  respectivamente, e as equações resultantes na equação (2.43), obtém-se a equação da qual é calculado o fluxo médio no nodo, qual seja,

$$\begin{aligned} & \{\Sigma_{ig}^n(t_\ell) + \sum_{u=x,y,z} \frac{A_{0gul}^n(t_\ell) + A_{0gur}^n(t_\ell)}{a_u^n}\} \bar{\phi}_g^n(t_\ell) - \sum_{g'=1}^2 \left\{ \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \nu \Sigma_{g'}^n(t_\ell) + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right\} \bar{\phi}_{g'}^n(t_\ell) = \\ & = \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} \{ (1 - \{A_{1gul}^n(t_\ell) + A_{2gur}^n(t_\ell)\}) \bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) + (1 - \{A_{1gur}^n(t_\ell) + A_{2gul}^n(t_\ell)\}) \bar{J}_{gur}^{-n}(t_\ell) - \\ & - \{A_{3gur}^n(t_\ell) - A_{3gul}^n(t_\ell)\} c_{3gu}^n(t_\ell) - \{A_{0gul}^n(t_\ell) + A_{0gur}^n(t_\ell)\} c_{4gu}^n(t_\ell) \} \quad , \end{aligned} \quad (2.90)$$

onde  $\Sigma_{ig}^n(t_\ell) \equiv \Sigma_{ag}^n(t_\ell) + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{g'g}^n(t_\ell)$ .

## 2.5 As equações de depleção nodalizadas

Usando um raciocínio análogo ao visto na metodologia nodal, e considerando a equação (2.39), podemos integrá-la no volume  $V_n \equiv a_x^n a_y^n a_z^n$  de um nodo  $n$  e posteriormente dividi-la pelo volume do nodo. Assim:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_i(\vec{r}, t) dV \right) = - \sum_{g=1}^G \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{ag}^i(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) dV + \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{I_f} \left[ \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{Xg}^j(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) dV + c_{i,k,j} \lambda_j \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_j(\vec{r}, t) dV \right] - \\ & - c_{i,k} \lambda_i \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_i(\vec{r}, t) dV \end{aligned} \quad (2.91)$$

Assumindo que o nodo é homogêneo, as concentrações isotópicas no nodo  $n$  podem ser definidas como

$$N_m^n(t) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_m(\vec{r}, t) dV \quad ; \quad m = i, j \quad . \quad (2.92)$$

Levando a definição dada por (2.92) na equação (2.91):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} N_i^n(t) = & - \sum_{g=1}^G \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{ag}^i(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) dV - c_{i,k} \lambda_i N_i^n(t) \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{I_f} \left[ \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{Xg}^j(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) dV + c_{i,k,j} \lambda_j N_j^n(t) \right] \end{aligned} \quad (2.93)$$

e definindo

$$\bar{\Sigma}_{Xg}^{m,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{Xg}^m(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) dV \quad ; \quad m = i, j \quad , \quad (2.94)$$

a expressão (2.93) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} N_i^n(t) = & - \sum_{g=1}^G \bar{\Sigma}_{ag}^{i,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) - c_{i,k} \lambda_i N_i^n(t) \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{I_f} \left[ \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \bar{\Sigma}_{Xg}^{j,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) + c_{i,k,j} \lambda_j N_j^n(t) \right] \quad , \end{aligned} \quad (2.95)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} N_i^n(t) = & - \left( \sum_{g=1}^G \bar{\sigma}_{ag}^{i,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) + c_{i,k} \lambda_i \right) N_i^n(t) + \\ & + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{I_f} \left[ \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \bar{\sigma}_{Xg}^{j,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) + c_{i,k,j} \lambda_j \right] N_j^n(t) \quad , \end{aligned} \quad (2.96)$$

onde

$$\bar{\sigma}_{ag}^{m,n} \equiv \frac{\bar{\Sigma}_{ag}^{m,n}}{N_i^n(t)} \quad ; \quad m = i, j \quad . \quad (2.97)$$

Podemos generalizar a equação (2.96), por meio da expressão

$$\frac{d}{dt} N_i^n(t) = \sum_{j=1}^{I_f} h_{ij}^n(t) N_j^n(t) \quad , \quad (2.98)$$

onde os coeficientes  $h_{ij}^n(t)$  são dados por

$$h_{ij}^n(t) = \begin{cases} c_{i,k,j} \lambda_j \quad \text{ou} \quad \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \bar{\sigma}_{\gamma g}^{j,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) & \text{para } j < i \\ - \left( \sum_{g=1}^G \bar{\sigma}_{ag}^{i,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) + c_{i,k} \lambda_i \right) & \text{para } j = i \\ c_{i,k,j} \lambda_j \quad \text{ou} \quad \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \bar{\sigma}_{(n,2n)g}^{j,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) \quad \text{ou} \quad \Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \bar{\sigma}_{(n,\alpha)g}^{j,n}(t) \bar{\phi}_g^n(t) \quad . & \text{para } j > i \end{cases}$$

Convém destacar que, como vemos na equação acima, os coeficientes  $h_{ij}^n(t)$  para  $j > i$  representam as possíveis reações de realimentação existentes na cadeia de depleção (reações  $(n, 2n)$ ,  $(n, \alpha)$  e decaimentos alfa).

Podemos reescrever a equação (2.98), matricialmente, da seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} N_1^n(t) \\ N_2^n(t) \\ \vdots \\ N_{I_f}^n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11}^n(t) & h_{12}^n(t) & \dots & h_{1I_f}^n(t) \\ h_{21}^n(t) & h_{22}^n(t) & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{I_f 1}^n(t) & \dots & \dots & h_{I_f I_f}^n(t) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1^n(t) \\ N_2^n(t) \\ \vdots \\ N_{I_f}^n(t) \end{bmatrix} \quad (2.99)$$

ou seja

$$\frac{d}{dt} \tilde{N}^n(t) = \tilde{E}^n \tilde{N}^n(t) \quad , \quad (2.100)$$

onde a matriz  $\tilde{E}^n = [h_{ij}^n(t)]$  é chamada de matriz de evolução do sistema.

Considerando que na aproximação quase-estática o fluxo de nêutrons é mantido constante no interior de cada intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_\ell)$ , a matriz de evolução

$\tilde{E}^n = [h_{ij}^n(t)]$  da equação (2.100) tornar-se-á uma matriz de evolução estacionária para o intervalo de tempo considerado. Assim, podemos reescrever a equação (2.100) como:

$$\frac{d}{dt} \tilde{N}^n(t) = \tilde{E}_\ell^n \tilde{N}^n(t), \quad t_{\ell-1} \leq t < t_\ell \quad (2.101)$$

onde  $\ell$  representa o intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_\ell)$  e  $\tilde{E}^n = [h_{ij}^n(t_{\ell-1})]$  é chamada de matriz de evolução estacionária, composta pelos coeficientes calculados no início de cada intervalo de queima.

## 3 Métodos de solução

### 3.1 Métodos de cadeias lineares

Neste método, utilizado pelos códigos MCB (CETNAR, 1998) e MCNPX (PELOWITZ, 2008), dada uma cadeia complexa de decaimentos e de transmutações nucleares de nuclídeos  $x_i$ , ocorre a sua decomposição em um conjunto de cadeias lineares representando todas as possíveis trajetórias que poderiam ocorrer, como pode ser visualizado na Figura 3.1 (ISOTALO, 2013):

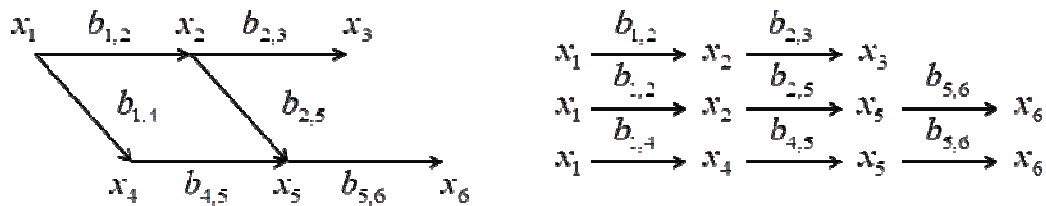


Figura 3.1: Decomposição de uma cadeia de decaimentos e transmutações nucleares em cadeias lineares.

Na Figura 4.1, o termo  $b_{i,j}$  depende das seções de choque caracterizando as reações nucleares ocorridas com os nuclídeos e do fluxo de nêutrons. Podemos observar pela figura que todas as cadeias lineares iniciam-se a partir de um único elemento, seguindo todas as possíveis reações que possam ocorrer. As concentrações dos nuclídeos encontrados em cada cadeia linear são calculadas assumindo que apenas o primeiro nuclídeo possui uma concentração isotópica não nula. Para obtermos a solução do problema original, consideramos cada nuclídeo com a sua composição inicial, e fazemos a superposição dos resultados (ISOTALO, 2013).

Convém ressaltar que cadeias cíclicas, ou seja, que apresentam reações de realimentação, não podem ser linearizadas, pois levaria a um número infinito de cadeias lineares.

### 3.1.1 Soluções de Bateman

As equações de Bateman (BATEMAN, 1910) para uma cadeia linear de  $I_f$  elementos, considerando reações de decaimento e transmutações nucleares, descrevendo as concentrações dos núclídeos pode ser escrita, utilizando a equação (2.49), como (ISOTALO, 2013):

$$\frac{d}{dt} N_i(t) = -\lambda_i^{efetivo} N_i(t) + \sum_{j=1}^{i-1} c_{i,k,j}^{efetivo} \lambda_j^{efetivo} N_j(t) ; \quad i = 1, \dots, I_f. \quad (3.1)$$

onde

$$\lambda_i^{efetivo} \equiv \sum_{g=1}^G \sigma_{ag}^i \bar{\phi}_g^n(t) + c_{i,k} \lambda_i \quad (3.2)$$

$$c_{i,k,j}^{efetivo} \equiv \frac{\Upsilon_{ij} \sum_{g=1}^G \sigma_{Xg}^j \bar{\phi}_g^n(t) + c_{i,k,j} \lambda_j}{\lambda_j^{efetivo}} . \quad (3.3)$$

Assumindo que apenas o primeiro núclídeo tenha uma concentração isotópica inicial diferente de zero,  $N_1(0)$ , a solução para a equação (3.1) será:

$$N_i(t) = N_1(0) C_i \sum_{m=1}^i \alpha_m^i \exp(-\lambda_m^{efetivo} t) , \quad (3.4)$$

onde

$$C_i = \prod_{j=1}^{i-1} c_{j+1,k,j}^{efetivo} \quad (3.5)$$

e

$$\alpha_m^i = \frac{\prod_{j=1}^{i-1} \lambda_j^{efetivo}}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^i (\lambda_j^{efetivo} - \lambda_m^{efetivo})} . \quad (3.6)$$

O conjunto de soluções dadas por (3.4) são as chamadas soluções 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. Podemos encontrar na literatura uma dedução mais formal para a solução de Bateman, utilizando análise complexa e transformada de Laplace (PRESSYANOV, 2002, OLIVEIRA *et al.*, 2012).

### 3.1.2 Solução geral analítica

Ao analisarmos a expressão (3.6), podemos observar que o coeficiente  $\alpha_m^i$  só pode ser calculado caso as constantes de decaimento efetivas sejam sempre diferentes, ou seja, se  $\lambda_m^{\text{efetivo}} \neq \lambda_j^{\text{efetivo}}$  para  $j \neq m$ . Caso essa condição não ocorra, o coeficiente se tornará infinito. Considerando esta problemática, foi desenvolvida (CETNAR, 2006) uma metodologia que permite a utilização de constantes de decaimento efetivas iguais nas equações de Bateman.

Para uma cadeia de  $Z$  núclídeos que tenha  $d$  constantes de decaimento efetivas diferentes  $\lambda_m^{\text{efetivo}}$ , cada uma das quais repetidas  $l_m$  vezes  $\sum_{m=1}^d l_m = Z$ , a solução geral é (ISOTALO, 2011):

$$N_i(t) = N_1(0) \frac{C_i}{\lambda_i^{\text{efetivo}}} \sum_{m=1}^d \lambda_m^{\text{efetivo}} \alpha_m \exp(-\lambda_m^{\text{efetivo}} t) \sum_l^{\mu_m} \frac{\lambda_m^{\text{efetivo}} t}{l!} \Omega_{m, \mu_m - l}, \quad (3.7)$$

onde

$$\mu_m = l_m - 1,$$

$$C_i = \prod_{j=1}^{i-1} c_{j+1, k, j}^{\text{efetivo}},$$

$$\alpha_m = \prod_{\substack{j=1 \\ j \neq m}}^d \left( \frac{\lambda_j^{\text{efetivo}}}{\lambda_j^{\text{efetivo}} - \lambda_m^{\text{efetivo}}} \right)^{l_j},$$

$$\Omega_{m, j} = \sum_{h_1=0}^j \sum_{h_2=0}^j \cdots \sum_{h_{m-1}=0}^j \sum_{h_{m+1}=0}^j \cdots \sum_{h_d=0}^j \prod_{\substack{r=1 \\ r \neq m}}^i \binom{h_r + \mu_r}{\mu_r} \left( \frac{\lambda_j^{\text{efetivo}}}{\lambda_j^{\text{efetivo}} - \lambda_m^{\text{efetivo}}} \right)^{l_j} \delta \left( j, \sum_{\substack{s=1 \\ s \neq m}}^d h_s \right).$$

Importante salientar que a expressão (3.7) recai nas soluções de Bateman quando não há constantes de decaimento efetivas repetidas, ou seja,  $l_m = 1$  para todo  $m$ .

## 3.2 Métodos utilizando a matriz exponencial

Uma das formas mais utilizadas para se calcular as equações de depleção, consiste no cálculo da matriz exponencial. Para o cálculo desta matriz, parte-se da forma das equações de depleção escritas na sua forma matricial, qual seja

$$\frac{d\tilde{N}(t)}{dt} = \tilde{E} \tilde{N}(t) \quad , \quad (3.8)$$

onde  $\tilde{N}(t)$  é uma matriz coluna contendo as concentrações dos nuclídeos, e  $\tilde{E}$  é a chamada matriz de evolução ou matriz de depleção do sistema.

Considerando que no instante inicial do intervalo, onde a matriz de evolução é considerada constante, tenhamos como condição inicial  $\tilde{N}(t = 0) = \tilde{N}_0$ , o sistema de equações dado por (3.8) possui solução formal dada por

$$\tilde{N}(t) = \tilde{A}(t)\tilde{N}_0 \quad , \quad (3.9)$$

onde

$$\tilde{A}(t) = e^{\tilde{E}t} \quad (3.10)$$

é a chamada matriz exponencial. Nesses métodos, a solução pode ser obtida independentemente da forma da matriz de evolução.

Os métodos que utilizam o cálculo da matriz exponencial são baseados em diferentes aproximações numéricas dessa matriz que, no caso geral, não pode ser calculada precisamente. Existem várias maneiras de se calcular a matriz exponencial. Em cálculos de queima, podemos exemplificar alguns métodos que são utilizados, tais como: Runge-Kutta (DEVOOGHT, 1980, DULLA, 2008) Decomposição de matrizes (MOLER, 1978), Subespaço de Krylov (YAMAMOTO, 2007), Aproximação de Chebyshev (PUSA, 2010) e a expansão em série de Taylor (SYED, 2009, MOLER, 1978).



## 3.2.1 Métodos de Séries

### 3.2.1.1 Série de Taylor

Dada uma função exponencial  $f(x)$ , no caso escalar, podemos defini-la pela convergência da série de Taylor infinita (SYED, 2009):

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \dots + \frac{x^k}{k!} + \dots \quad (3.11)$$

Fazendo uma analogia com o caso matricial, podemos formalmente definir a matriz exponencial da equação (3.10) através da convergência da série de Taylor infinita:

$$e^{\tilde{E}t} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\tilde{E}t)^k}{k!} = I + \tilde{E}t + \frac{t^2 \tilde{E}^2}{2!} + \dots \quad (3.12)$$

onde  $\tilde{E}^0 = I_n$  é a matriz identidade.

Para que a matriz exponencial possa ser calculada, é necessário aproximá-la através do truncamento da série de Taylor com  $k$  termos. A série de Taylor truncada é denotada por  $T_n(\tilde{E}t)$ , onde o subíndice  $n$  representa a maior potência da matriz  $\tilde{E}t$  na série truncada:

$$e^{\tilde{E}t} = T_n(\tilde{E}t) = \sum_{k=0}^n \frac{t^k \tilde{E}^k}{k!} \quad (3.13)$$

A ordem da aproximação  $n$  é escolhida adequadamente tal que o erro de truncamento seja menor que a tolerância do erro estipulada (OH, 1999).

### 3.2.1.2 Aproximação de Padé

Apesar de ser fácil a programação da expansão em série de Taylor, ela apresenta algumas dificuldades, tais como a possibilidade de ser ineficiente e pouco precisa. A diferença central entre a Série de Taylor e a aproximação de Padé é que aquela expande uma função em série de potências, enquanto esta expande uma função através da razão entre dois polinômios.

A aproximação de Padé para a matriz exponencial pode ser definida como (SYED, 2009):

$$e^{\tilde{E}} \approx r_{mn}(\tilde{E}) = \frac{p_{mn}(\tilde{E})}{q_{mn}(\tilde{E})} \quad (3.14)$$

onde

$$p_{mn}(\tilde{E}) = \sum_{j=0}^m \frac{(m+n-j)!m!}{(m+n)!j!(m-j)!} \tilde{E}^j \quad (3.15)$$

$$q_{mn}(\tilde{E}) = \sum_{j=0}^m \frac{(m+n-j)!n!}{(m+n)!j!(n-j)!} (-\tilde{E})^j \quad (3.16)$$

Podemos observar que, pelas equações acima, para o caso onde  $n=0$ , a aproximação de Padé resulta na expansão em série de Taylor para a matriz exponencial.

O polinômio de Padé possui o dobro da ordem daquele característico da série de Taylor. A aproximação de Padé somente é precisa próximo à origem de tal forma que a aproximação  $e^{\tilde{E}}$  não é válida quando  $\|\tilde{E}\|$  é muito grande (SYED, 2009). Pode ser demonstrado que para uma mesma ordem de polinômio, digamos ordem  $m$ , o erro do método da aproximação de Padé é menor quando comparado com a série de Taylor para  $m \geq 2$ .

Em virtude da aproximação de Padé e da série de Taylor requererem um considerável esforço computacional quando  $\|\tilde{E}\|$  é muito grande, pode-se resolver este problema através do método Scaling and squaring, visto a seguir.

### 3.2.1.3 Scaling and squaring

Ao analisarmos os métodos anteriores, aproximação de Padé e série de Taylor, podemos observar que os erros de arredondamento e o gasto computacional aumentam à medida que  $\|\tilde{E}\|$  aumenta. Essas dificuldades podem ser controladas através do uso de uma propriedade da função exponencial (MOLER, 1978):

$$e^{\tilde{E}} = \left( e^{\tilde{E}/m} \right)^m \quad (3.17)$$

onde  $m$  é um inteiro positivo. A ideia deste método é controlar o erro de arredondamento e aumentar a eficiência dos métodos de Padé e de Taylor, normalmente ao escolher o parâmetro  $m$  como a menor potência de 2 (dois),  $m = 2^j$ , de tal forma que  $\|\tilde{E}\|/m \leq 1$ . Se  $m$  for muito grande, haverá perda de precisão. Se  $m$  for muito pequeno, a série demorará a convergir. Assim, com essa restrição, teremos a seguinte aproximação (SYED, 2009):

$$e^{\tilde{E}/m} = e^{\tilde{E}/2^j} \approx r \left( \frac{\tilde{E}}{2^j} \right)^{2^j} \quad (3.18)$$

onde  $r$  pode ser representado pela aproximação de Padé ou de Taylor para a exponencial,

Podemos definir a matriz base da seguinte forma:

$$M \equiv e^{\tilde{E}/m} \quad (3.19)$$

ou seja,

$$e^{\tilde{E}} = M^m \quad (3.20)$$

Usando a definição da série de Taylor para a função exponencial:

$$M = \tilde{I} + \frac{\tilde{A}}{m} + \frac{(\tilde{A}/m)^2}{2!} + \dots + \frac{(\tilde{A}/m)^i}{i!} + \dots \quad (3.21)$$

Novamente, a matriz base pode ser aproximada pelo truncamento da série. A ordem da aproximação de Taylor para a matriz base é denotada por  $M_k$ . Poderíamos também usar a aproximação de Padé  $M_{m_n}$  para a determinação da matriz base e para a aproximação de Padé diagonal onde  $m = n$ , que é denotado por  $M_{m_m}$ .

Podemos perceber que uma vez que  $M^m$  depende do inteiro  $m$  e, como dito, a melhor estratégia é escolher  $m = 2^j$ . Podemos elevar ao quadrado  $j$  vezes a matriz  $M$  ao invés de multiplicarmos  $m = 2^j$  vezes.

$$e^{\tilde{E}} = \underbrace{[[[[M^2]^2] \dots]^2]}_{m \text{ vezes}} \quad (3.22)$$

Desta forma, precisaremos apenas de  $m$  multiplicações matriciais ao invés de  $k$  multiplicações necessárias para o cálculo direto.

### 3.2.1.4 Aproximação Racional de Chebyshev

O método de aproximação racional de Chebyshev (PUSA, 2010) é um novo método de matriz exponencial baseado na observação de que os autovalores dos coeficientes da matriz de evolução  $\tilde{E}$  parecem se agrupar em torno do eixo real negativo. Essa característica pode ser explorada através do uso da aproximação racional de Chebyshev da função exponencial para o intervalo  $(-\infty, 0]$ . A função racional resultante é então decomposta em uma forma polo-residual para evitar a instabilidade numérica. Quando a ordem do numerador e do denominador são escolhidos apropriadamente, os polos formam pares conjugados e as partes imaginárias se cancelam, resultando em uma variável real. Assim, uma aproximação de ordem  $(k, k)$  para uma função escalar se torna (ISOTALO, 2011)

$$e^z \approx \frac{P_k(z)}{Q_k(z)} = a_0 + \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{z + \theta_i} = a_0 + 2 \operatorname{Re} \left[ \sum_{i=1}^{k/2} \frac{a_i}{z + \theta_i} \right], \quad (3.23)$$

onde  $P_k$  e  $Q_k$  são polinômios de ordem  $k$ , cujos coeficientes devem ser escolhidos de tal forma que minimizem o desvio absoluto em relação à função exponencial no eixo real negativo,  $a_0$  é o valor limitante da aproximação no infinito, e  $a_i$  e  $\theta_i$  são os resíduos e os polos, respectivamente. Agora, se aplicarmos a aproximação à matriz de evolução  $\tilde{E}$ , teremos:

$$\tilde{A}(t) = e^{\tilde{E}t} \approx a_0 + 2 \operatorname{Re} \left[ \sum_{i=1}^{k/2} a_i (\tilde{E}t + \theta_i I)^{-1} \right] \quad (3.24)$$

Apesar de não existir um valor particular apropriado para a ordem  $k$  do polinômio, é necessário que a ordem seja um número par (PUSA, 2010).

## 3.2.2 Métodos Polinomiais

Considere os polinômios característicos da matriz  $\tilde{E}$  (MOLER, 1978):

$$c(z) = \det(zI - \tilde{E}) = z^n - \sum_{k=0}^{n-1} c_k z^k \quad (3.25)$$

Utilizando o teorema de Cayley-Hamilton, temos que  $c(\tilde{E}) = 0$ . Assim:

$$\tilde{E}^n = c_0 I + c_1 \tilde{E} + \dots + c_{n-1} \tilde{E}^{n-1} \quad (3.26)$$

Daí segue que qualquer potência da matriz  $\tilde{E}$  pode ser escrita em termos de  $I, \tilde{E}, \dots, \tilde{E}^{n-1}$ :

$$\tilde{E}^k = \sum_{j=0}^{n-1} \beta_{kj} \tilde{E}^j \quad (3.27)$$

A equação acima implica que  $e^{\tilde{E}t}$  é um polinômio em  $\tilde{E}$  com coeficientes analíticos em  $t$ :

$$\begin{aligned} e^{\tilde{E}t} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k \tilde{E}^k}{k!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!} \left[ \sum_{j=0}^{n-1} \beta_{kj} \tilde{E}^j \right] \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \left[ \sum_{k=0}^{\infty} \beta_{kj} \frac{t^k}{k!} \right] \tilde{E}^j \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j(t) \tilde{E}^j \end{aligned} \quad (3.28)$$

Os métodos desta seção, descritos brevemente, envolverão a análise dos polinômios característicos da matriz  $\tilde{E}$ .

### 3.2.2.1 Interpolação de Lagrange

Sendo  $\lambda_1, \dots, \lambda_k$  os autovalores, todos distintos entre si, da matriz  $\tilde{E}$ , podemos escrever a fórmula de Lagrange para  $e^{\tilde{E}t}$  como (MOLER, 1978):

$$e^{\tilde{E}t} = \sum_{j=0}^{n-1} e^{\lambda_j t} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \frac{(\tilde{E} - \lambda_k I)}{(\lambda_j - \lambda_k)} \quad (3.29)$$

### 3.2.2.2 Interpolação de Newton

De forma análoga ao caso anterior, sejam  $\lambda(\tilde{E}) = \{\lambda_1, \dots, \lambda_j\}$  os autovalores da matriz  $\tilde{E}$ . Podemos escrever a interpolação de Newton para  $e^{\tilde{E}t}$  da seguinte forma  $\tilde{E}$  (MOLER, 1978):

$$e^{\tilde{E}t} = e^{\lambda_1 t} I + \sum_{j=2}^n [\lambda_1, \dots, \lambda_j] \prod_{k=1}^{j-1} (\tilde{E} - \lambda_k I) \quad (3.30)$$

O termo  $[\lambda_1, \dots, \lambda_j]$  pode ser calculado recursivamente por:

$$[\lambda_1, \lambda_2] = \frac{(e^{\lambda_1 t} - e^{\lambda_2 t})}{\lambda_1 - \lambda_2} \quad (3.31)$$

$$[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{k+1}] = \frac{[\lambda_1, \dots, \lambda_k] - [\lambda_2, \dots, \lambda_{k+1}]}{\lambda_1 - \lambda_{k+1}} ; \quad k \geq 2 \quad (3.32)$$

### 3.2.2.3 Vandermonde

Como método alternativo ao cálculo da matriz que aparece na equação (3.28),

$$\tilde{E}_j = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n \frac{(\tilde{E} - \lambda_k I)}{(\lambda_j - \lambda_k)} , \quad (3.33)$$

podemos citar o método da matriz de Vandermonde, que faz uso da seguinte matriz (MOLER, 1978):

$$V = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \lambda_1^{n-1} & \lambda_2^{n-1} & \dots & \lambda_n^{n-1} \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

Se  $v_{jk}$  são elementos da matriz  $V^{-1}$ , então:

$$A_j = \sum_{k=1}^n v_{jk} A^{k-1} \quad (3.35)$$

Logo, a exponencial da matriz de depleção poderá ser escrita como:

$$e^{\tilde{E}t} = \sum_{j=1}^n e^{\lambda_j t} A_j \quad (3.36)$$

### 3.2.3 Métodos de decomposição

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

$$\tilde{E} = \tilde{C}\tilde{D}\tilde{C}^{-1} \quad (3.37)$$

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

$$e^{\tilde{E}t} = I + \tilde{E}t + \frac{\tilde{E}^2 t^2}{2!} + \dots \quad (3.38)$$

permite-nos escrever (3.37) como:

$$e^{\tilde{E}t} = \tilde{C}e^{\tilde{D}t}\tilde{C}^{-1} \quad (3.39)$$

#### 3.2.3.1 Autovetores e autovalores

Neste método, a matriz  $\tilde{C}$  é aproximada pela matriz  $\tilde{B}$  dada por:

$$\tilde{C} \approx \tilde{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ b_{m1} & \cdots & b_{mn} \end{pmatrix} \quad (3.40)$$

onde

$$b_k = \begin{bmatrix} b_{1k} \\ b_{2k} \\ \cdot \\ \cdot \\ b_{mk} \end{bmatrix} ; \quad k = 1, n \quad , \quad (3.41)$$

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

$$\tilde{E}b_k = \lambda_k b_k \quad ; \quad k = 1, n \quad (3.42)$$

O sistema de equações (3.42) pode ser reescrito matricialmente como:

$$\tilde{E}\tilde{B} = \tilde{B}\tilde{\Lambda} \quad (3.43)$$

ou ainda

$$\tilde{E} = \tilde{B}\tilde{\Lambda}\tilde{B}^{-1} \quad (3.44)$$

Sendo  $\tilde{\Lambda}$  uma matriz diagonal cujos elementos são os próprios autovalores da matriz  $\tilde{E}$ . De forma análoga à equação (3.39), podemos escrever a equação (3.44) como

$$e^{\tilde{E}t} = \tilde{B}e^{\tilde{\Lambda}t}\tilde{B}^{-1} \quad , \quad (3.45)$$

ou seja, a matriz que se faz necessária para o cálculo da exponencial da matriz  $\tilde{E}$  é a própria matriz constituída pelos seus autovetores. Por outro lado, o cálculo da exponencial da matriz  $\tilde{\Lambda}$ , torna-se relativamente simples:

$$e^{\tilde{\Lambda}t} = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1 t} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & e^{\lambda_n t} \end{pmatrix} \quad (3.46)$$

De posse da matriz dada por (3.46), podemos calcular a matriz exponencial através da equação (3.39).



### 3.2.3.2 Método de Shur Parlett

No método de Schur Parlett, a matriz de evolução  $\tilde{E}$  é decomposta da seguinte forma (SYED, 2009):

$$\tilde{E} = \tilde{U}\tilde{T}\tilde{U}^t \quad (3.47)$$

onde a matriz unitária  $\tilde{U}$  e a matriz triangular superior  $\tilde{T}$  existem se  $\tilde{E}$  for real e tiver autovalores reais. Se  $\tilde{E}$  possuir autovalores complexos, uma das soluções possíveis seria fazer  $\tilde{U}$  e  $\tilde{T}$  complexos (e substituir  $\tilde{U}^t$  por  $\tilde{U}^*$ ). Uma vez decomposta a matriz  $\tilde{E}$ , a matriz exponencial pode ser calculada:

$$e^{\tilde{E}} = \tilde{U}e^{\tilde{T}}\tilde{U}^* \quad (3.48)$$

onde  $\tilde{T}$  é a matriz triangular ou quase-triangular. O cálculo da matriz exponencial  $e^{\tilde{T}}$  de uma matriz triangular superior é feita através do algoritmo que foi desenvolvido por PARLETT (1976). Se  $\tilde{T}$  é uma matriz triangular superior com os autovalores  $\lambda_1, \dots, \lambda_j$  na diagonal, então  $e^{\tilde{T}}$  é triangular superior com  $e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_n}$  na diagonal. Convém observar que se os autovalores tiverem valores diferentes mas próximos entre si, poderá resultar em imprecisões no cálculo.

### 3.2.4 Métodos de equações diferenciais ordinárias

Estes métodos concentram-se na resolução do seguinte sistema de equações:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x), \quad x(0) = x_0 \quad (3.49)$$

e obter a solução para diferentes valores de  $t$ . Todos os métodos envolvem a sequência de valores  $0 = t_0, t_1, \dots, t_j = t$  com passos fixos ou variáveis  $h_i = t_{i+1} - t_i$ . Todos os métodos produzem vetores  $x_i$  que aproximam  $x(t_i)$ .

Existem na literatura inúmeros métodos que utilizam a metodologia citada acima, e como exemplo podemos citar dois métodos que são amplamente utilizados para resolver as equações diferenciais: Método de Taylor e Runge-Kutta, ambos de quarta ordem e

com o tamanho do passo fixo. O método de Runge-Kutta de 4º ordem é baseado na seguinte equação:

$$x_{i+1} = x_i + (a_1k_1 + a_2k_2 + a_3k_3 + a_4k_4)h \quad (3.50)$$

onde conhecendo o valor de  $x = x_i$  em  $t_i$ , podemos achar o valor de  $x = x_{i+1}$  em  $t_{i+1}$ .

A equação (3.50) pode ser comparada aos cinco primeiros termos da série de Taylor:

$$\begin{aligned} x_{i+1} = x_i + \frac{dx}{dt} \Big|_{x_i, t_i} (t_{i+1} - t_i) + \frac{1}{2!} \frac{d^2x}{dt^2} \Big|_{x_i, t_i} (t_{i+1} - t_i)^2 \\ + \frac{1}{3!} \frac{d^3x}{dt^3} \Big|_{x_i, t_i} (t_{i+1} - t_i)^3 + \frac{1}{4!} \frac{d^4x}{dt^4} \Big|_{x_i, t_i} (t_{i+1} - t_i)^4 \end{aligned} \quad (3.51)$$

Sabendo que o passo é fixo  $h = t_{i+1} - t_i$  e utilizando a equação (3.49):

$$x_{i+1} = x_i + f(x_i, t_i)h + \frac{1}{2!} f'(x_i, t_i)h^2 + \frac{1}{3!} f''(x_i, t_i)h^3 + \frac{1}{4!} f'''(x_i, t_i)h^4 \quad (3.52)$$

Baseado na equação (3.52), podemos escrever a seguinte solução:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)h \quad (3.53)$$

onde:

$$k_1 = f(t_i, x_i)$$

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{1}{2}h, x_i + \frac{1}{2}k_1h\right)$$

$$k_3 = f\left(t_i + \frac{1}{2}h, x_i + \frac{1}{2}k_2h\right)$$

$$k_4 = f(t_i + h, x_i + k_3h)$$

Para o nosso caso particular,  $f(t, x) = \tilde{E}x$  sendo as equações dadas por:

$$x_{i+1} = \left( I + h\tilde{A} + \dots + \frac{h^4}{4!} \tilde{A}^4 \right) x_i$$

$$x_{i+1} = x_i + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

onde  $k_1 = h\tilde{E}x_j$ ,  $k_2 = h\tilde{E}(x_j + \frac{1}{2}k_1)$ ,  $k_3 = h\tilde{E}(x_j + \frac{1}{2}k_2)$  e  $k_4 = h\tilde{E}(x_j + k_3)$ .

### 3.2.5 Método de Potenciação e polinômios ortogonais

Este método é um aprimoramento de um estudo originalmente desenvolvido por NEITZEL (1987) em que a matriz de transição é calculada por um procedimento de potenciação (PLANT, 1968) acoplado a um método baseado em polinômios ortogonais (SOUZA). Neste estudo, a matriz exponencial é obtida através da resolução do seguinte sistema de equações lineares (SILVA et al., 2010):

$$FA(t) = G \quad (3.54)$$

onde:

$$F = \sum_{k=0}^{n+2} (-1)^{n-k} (n-k+3)! (\gamma_{n-k} + 2\gamma_{n-k+1} + \gamma_{n-k+2}) (Et)^k \quad (3.55)$$

$$G = \sum_{k=0}^{n+3} (\alpha_k + \beta_{k-1} + \alpha_{k-1}) (Et)^k \quad (3.56)$$

$$\beta_j = \sum_{l=0}^j \frac{\beta_{l-1}}{(l+1)!} \quad (3.57)$$

$$\alpha_{n+2-j} = (j+1)! (-1)^j (\gamma_{j-2} + 2\gamma_{j-1} + \gamma_j) \quad (3.58)$$

para  $i = 1, 2, \dots, n$ . Os coeficientes  $\gamma_j$  que aparecem em (3.55) e (3.58) 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:

$$\gamma_l^n = \frac{(n+1-l)(n+l+\theta+\delta)}{l(l+\delta)} \quad (3.59)$$

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 (3.54) pode ser calculado por qualquer método de resolução de equações lineares; por exemplo, eliminação Gaussiana.

## 4 Método Proposto

### 4.1 Introdução

Neste capítulo, as equações de depleção serão resolvidas para uma cadeia de actínidos fechada, onde serão tratadas as reações de realimentação que ocorrem entre núclídeos por meio de reações  $(n, 2n)$  e decaimentos alfa. Basicamente, no desenvolvimento da tese, procuraremos atender aos 3 (três) propósitos descritos na seção 1.3.

Para lidarmos com o primeiro objetivo, propomos decompor os intervalos de queima em subintervalos de queima, permitindo um refinamento na malha. Para o segundo objetivo, apresentaremos um método algébrico para desacoplarmos um sistema de duas equações diferenciais de primeira ordem. Por fim, para o terceiro objetivo utilizaremos duas alternativas: trataremos os acoplamentos como termos fontes das equações e, como segunda proposta, faremos um revezamento da metodologia de desacoplamento entre duas equações para a cadeia completa.

Sendo assim, ao longo deste capítulo, detalharemos a abordagem destinada a solucionar cada um dos três objetivos descritos acima.

### 4.2 Cadeia dos Actínidos e suas respectivas equações

Em reatores cujo combustível é o urânio, existe uma contínua transmutação do  $^{235}\text{U}$ , através da fissão e captura radiativa, e formação dos isótopos do plutônio através de captura radiativa e decaimento beta. A sequência do plutônio se inicia com o  $^{238}\text{Pu}$ , proveniente da captura neutrônica do  $^{237}\text{Np}$  e consequente decaimento do  $^{238}\text{Np}$ , e continua até o isótopo  $^{242}\text{Pu}$ , incluindo também outros radionuclídeos pesados – por exemplo,  $^{241}\text{Am}$ , que é produzido principalmente pelo decaimento beta do  $^{241}\text{Pu}$ . Similarmente, radionuclídeos de massa atômica de números 236 e 237 ( $^{236}\text{U}$  e  $^{237}\text{Np}$ ),

são formados por meio de captura radiativa no  $^{235}\text{U}$  e, no caso do  $^{237}\text{Np}$ , subsequente captura radiativa e decaimento beta (DAVID, 2004).

A maior parte da energia liberada no reator provém da fissão do  $^{235}\text{U}$ . A contribuição do  $^{238}\text{U}$  é relativamente pequena na maioria dos reatores, sendo portanto ignorada para fins de cálculo. Contudo, a produção e fissão do  $^{239}\text{Pu}$  exerce um papel relevante no balanço de energia do reator. Assim, a energia total liberada pode ser considerada como sendo composta pela soma da energia proveniente dos isótopos físseis do plutônio ( $^{239}\text{Pu}$  e  $^{241}\text{Pu}$ ) mais a soma da energia liberada pelo  $^{235}\text{U}$  (DAVID, 2004). Considerando que a densidade de potência em  $\text{watts}/\text{cm}^3$  em qualquer ponto  $\vec{r}$  no reator é dada por (LEWIS, 2008):

$$P''(\vec{r}) = \gamma \sum_f(\vec{r})\phi(\vec{r}) \quad (4.1)$$

onde  $\gamma$  é o número de  $W \times s / \text{fissão}$  e  $\sum_f(\vec{r})\phi(\vec{r})$  é o número de  $\text{fissões}/\text{cm}^3/\text{s}$ , podemos escrever a produção de potência proveniente dos três isótopos descritos acima pela seguinte expressão:

$$P''(\vec{r}) = \gamma \left[ \sigma_f^{U235}(\vec{r})N^{U235}(t) + \sigma_f^{Pu239}(\vec{r})N^{Pu239}(t) + \sigma_f^{Pu241}(\vec{r})N^{Pu241}(t) \right] \phi(\vec{r}) \quad (4.2)$$

Para sermos mais precisos, na equação (4.2) poderíamos ter considerado a contribuição proveniente do  $^{243}\text{Pu}$ . No entanto, em virtude desse nuclídeo possuir uma meia-vida de aproximadamente 4,95 horas (MORSS *et al.*, 2010), podemos desprezar essa contribuição sem maiores impactos no cálculo da distribuição de potência.

Considerando a relevância do assunto, torna-se imprescindível calcularmos com a maior exatidão possível as concentrações isotópicas dos nuclídeos presentes em uma cadeia de depleção, com o intuito de predizermos com clareza a potência do reator. Contudo, visando uma otimização computacional, é usual lidarmos com uma cadeia de nuclídeos simplificada, onde apenas os termos mais relevantes são considerados. Sendo assim, podemos ver na Figura 4.1 a cadeia de actínídeos que será utilizada nesta tese.

Podemos perceber pela figura que consideramos as reações de realimentação provenientes do acoplamento entre actínídeos por meio de reações  $(n,2n)$  e por meio de decaimentos alfa.

As caixas vazias presentes nesta cadeia, representam núclídeos em que, por possuírem um tempo de meia-vida consideravelmente pequeno quando comparado aos demais núclídeos, podem ser desprezadas as suas respectivas reações nucleares sem alterarem significativamente o resultado final das concentrações isotópicas. Como exemplos dessa característica, podemos citar o  $^{239}\text{U}$ , que possui uma meia-vida de 23,45 minutos, resultante da reação de captura radiativa do  $^{238}\text{U}$ , o  $^{238}\text{Np}$  com uma meia-vida de 2,11 dias, possuindo origem na reação de captura radiativa do  $^{237}\text{Np}$ , e o  $^{237}\text{U}$ , com uma meia-vida de 6,75 dias, cuja formação deve-se à reação  $(n,2n)$  ocorrida com o  $^{238}\text{U}$  somada à captura radiativa ocorrida com o  $^{236}\text{U}$  (MORSS *et al.*, 2010).

Outro fato relevante, consiste no fato que, nesta cadeia, a simplificação imposta pela necessidade de otimização computacional mostra-se adequada em virtude de estarmos tratando de um cálculo de produção, uma vez que estamos preocupados apenas com os núclídeos 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 núclídeos presentes no combustível após a sua retirada do núcleo, com o intuito de dar a melhor destinação possível para o elemento combustível.

Na cadeia apresentada na Figura 4.1, os elementos serão ordenados da maneira apresentada na Tabela 4.1:

Tabela 4.1 : Ordenamento dos actinídeos na cadeia de depleção.

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

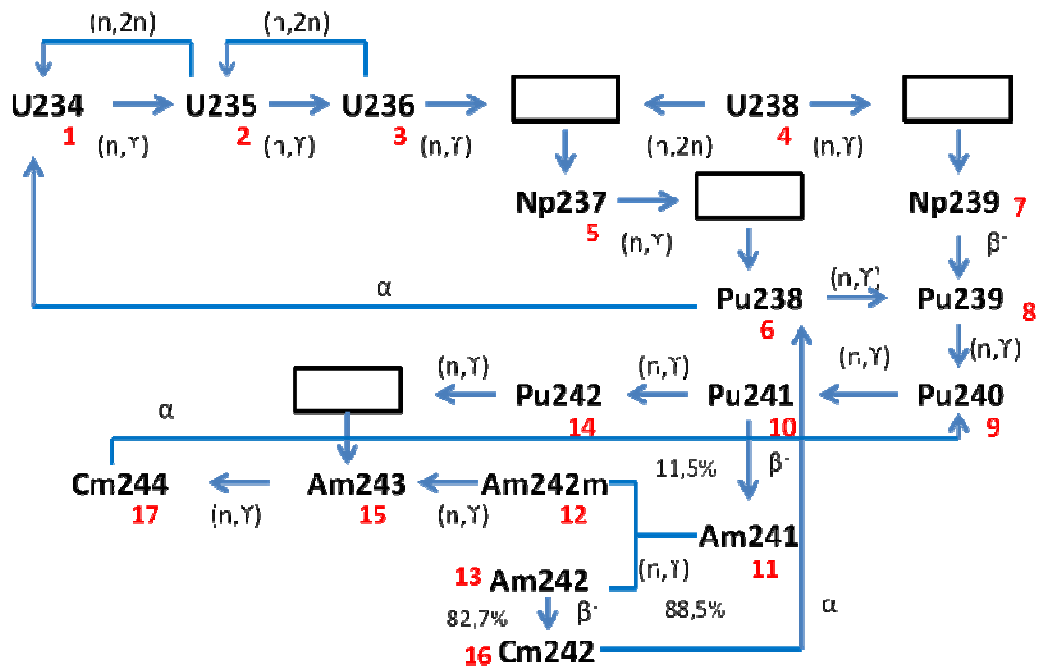


Figura 4.1: Cadeia de Actinídeos



Pela Figura 4.1, podemos perceber que a reação de realimentação por meio de reações ( $n, 2n$ ) do  $^{238}\text{U}$ , que gera o actínido  $^{237}\text{U}$ , não foi considerada como tal em virtude da apropriada escolha da ordem dos nuclídeos. Como dito anteriormente, o  $^{237}\text{U}$  foi desconsiderado devido ao valor de sua meia-vida. Sendo assim, numeramos a cadeia de tal forma que esse desacoplamento pudesse ser desconsiderado.

A Tabela 4.2 mostra algumas propriedades nucleares dos nuclídeos presentes na cadeia da Figura 4.1 (MORSS *et al.*, 2010).

Tabela 4.2 Propriedades nucleares dos nuclídeos

Nuclídeo	Meia-vida	Modo de decaimento	Principais Radiações (MeV)	Método de produção
$^{234}\text{U}$	$2,455 \times 10^5$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 4,777 (72%)	natural
	$2,0 \times 10^{16}$ anos	FE	4,723 (28%)	
$^{235}\text{U}$	$2,455 \times 10^5$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 4,397 (57%)	natural
		FE	4,367 (18%)	
		$\gamma$ 0,186		
$^{236}\text{U}$	$2,3415 \times 10^7$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 4,494 (74%)	$^{235}\text{U}(n, \gamma)$
	$2,43 \times 10^{16}$ anos	FE	4,445 (26%)	
$^{238}\text{U}$	$4,468 \times 10^9$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 4,196 (77%)	Natural
	$8,30 \times 10^{15}$ anos	FE	4,149 (23%)	
$^{237}\text{Np}$	$2,144 \times 10^6$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 4,788 (51%)	
	$> 1,0 \times 10^{18}$ anos	FE	4,770 (19%)	
	$\gamma$ 0,086			
$^{239}\text{Np}$	2,356 dias	$\beta^-$	$\beta^-$ 0,72	Filho do $^{243}\text{Am}$
			$\gamma$ 0,106	Filho do $^{239}\text{U}$
$^{238}\text{Pu}$	87,7 anos	$\alpha$	$\alpha$ 5,499 (70,9%)	Filho do $^{242}\text{Cm}$
	$4,77 \times 10^{10}$ anos	FE $1,85 \times 10^{-7}\%$	5,456 (29%)	Filho do $^{238}\text{Np}$
$^{239}\text{Pu}$	$2,411 \times 10^4$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 5,157 (70,77%)	Filho do $^{239}\text{Np}$
	$8,0 \times 10^{15}$ anos	FE $3,0 \times 10^{-10}\%$	5,144 (17,11%)	
	$\gamma$ 0,129		5,106 (11,94%)	
$^{240}\text{Pu}$	$6,561 \times 10^3$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 5,168 (72,8%)	CN
	$1,15 \times 10^{11}$ anos	FE $5,75 \times 10^{-6}\%$	5,124 (27,1%)	
$^{241}\text{Pu}$	14,35 anos	$\beta^- > 99,99\%$	$\alpha$ 4,896 (83,2%)	CN
		$\alpha$ $2,45 \times 10^{-3}\%$	4,853 (12,2%)	
		FE $2,4 \times 10^{-14}\%$	$\beta^-$ 0,021	
$^{242}\text{Pu}$	$3,75 \times 10^5$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 4,902 (76,49%)	CN
	$6,77 \times 10^{10}$ anos	FE $5,54 \times 10^{-4}\%$	4,856 (23,48%)	
$^{241}\text{Am}$	432,7 anos	$\alpha$	$\alpha$ 5,486 (84%)	Filho do $^{241}\text{Pu}$

	$1,15 \times 10^{14}$ anos	FE	5,443 (13,1%)	CN
$^{242}\text{Am}$	16,01 horas	$\beta^-$ 82,7%	$\beta^-$ 0,667	$^{241}\text{Am}(n, \gamma)$
		CE 17,3%	$\gamma$ 0,042	
$^{242m}\text{Am}$	141 horas	TI 99,5%	$\alpha$ 5,207 (89%)	$^{241}\text{Am}(n, \gamma)$
	$9,5 \times 10^{11}$ anos	FE $\alpha$ (0,45%)	5,141 (6,0%)	$^{241}\text{Am}(n, \gamma)$
			$\gamma$ 0,0493 (41%)	
$^{243}\text{Am}$	$7,38 \times 10^3$ anos	$\alpha$	$\alpha$ 5,277 (88%)	CN
	$2,0 \times 10^{14}$ anos	FE	5,234 (10,6%)	
			$\gamma$ 0,075 (68%)	
$^{242}\text{Cm}$	162,8 dias	$\alpha$	$\alpha$ 6,113 (74%)	$^{241}\text{Pu}(\alpha, n)$
	$7,0 \times 10^6$ anos	FE	6,070 (26,0%)	Filho do $^{242}\text{Am}$
$^{244}\text{Cm}$	18,10 anos	$\alpha$	$\alpha$ 5,805 (76,7%)	CN
	$135 \times 10^7$ anos	FE	5,764 (23,3%)	Filho do $^{244}\text{Am}$

FE, fissão espontânea; CN, captura neutrônica; CE, captura eletrônica; TI transição isomérica.

Abaixo, encontramos as equações de depleção caracterizando as transmutações nucleares e os respectivos decaimentos ocorridos entre os nuclídeos apresentados na cadeia de actínídeos mostrada na Figura 4.1:

$$\frac{d}{dt} N_1^n(t) = h_{11}^n N_1^n(t) + h_{12}^n N_2^n(t) + h_{16}^n N_6^n(t) \quad (4.3)$$

$$\frac{d}{dt} N_2^n(t) = h_{21}^n N_1^n(t) + h_{22}^n N_2^n(t) + h_{23}^n N_3^n(t) \quad (4.4)$$

$$\frac{d}{dt} N_3^n(t) = h_{32}^n N_2^n(t) + h_{33}^n N_3^n(t) \quad (4.5)$$

$$\frac{d}{dt} N_4^n(t) = h_{44}^n N_4^n(t) \quad (4.6)$$

$$\frac{d}{dt} N_5^n(t) = h_{53}^n N_3^n(t) + h_{54}^n N_4^n(t) + h_{55}^n N_5^n(t) \quad (4.7)$$

$$\frac{d}{dt} N_6^n(t) = h_{65}^n N_5^n(t) + h_{66}^n N_6^n(t) + h_{616}^n N_{16}^n(t) \quad (4.8)$$

$$\frac{d}{dt} N_7^n(t) = h_{74}^n N_4^n(t) + h_{77}^n N_7^n(t) \quad (4.9)$$

$$\frac{d}{dt} N_8^n(t) = h_{86}^n N_6^n(t) + h_{87}^n N_7^n(t) + h_{88}^n N_8^n(t) \quad (4.10)$$

$$\frac{d}{dt} N_9^n(t) = h_{98}^n N_8^n(t) + h_{99}^n N_9^n(t) + h_{917}^n N_{17}^n(t) \quad (4.11)$$

$$\frac{d}{dt} N_{10}^n(t) = h_{109}^n N_9^n(t) + h_{1010}^n N_{10}^n(t) \quad (4.12)$$

$$\frac{d}{dt} N_{11}^n(t) = h_{1110}^n N_{10}^n(t) + h_{1111}^n N_{11}^n(t) \quad (4.13)$$

$$\frac{d}{dt} N_{12}^n(t) = h_{1211}^n N_{11}^n(t) + h_{1212}^n N_{12}^n(t) \quad (4.14)$$

$$\frac{d}{dt} N_{13}^n(t) = h_{1311}^n N_{11}^n(t) + h_{1312}^n N_{12}^n(t) + h_{1313}^n N_{13}^n(t) \quad (4.15)$$

$$\frac{d}{dt} N_{14}^n(t) = h_{1410}^n N_{10}^n(t) + h_{1414}^n N_{14}^n(t) \quad (4.16)$$

$$\frac{d}{dt} N_{15}^n(t) = h_{1512}^n N_{12}^n(t) + h_{1514}^n N_{14}^n(t) + h_{1515}^n N_{15}^n(t) \quad (4.17)$$

$$\frac{d}{dt} N_{16}^n(t) = h_{1613}^n N_{13}^n(t) + h_{1616}^n N_{16}^n(t) \quad (4.18)$$

$$\frac{d}{dt} N_{17}^n(t) = h_{1715}^n N_{15}^n(t) + h_{1717}^n N_{17}^n(t) \quad (4.19)$$

Após termos apresentado as equações que guiarão o desenvolvimento do nosso trabalho, iremos detalhar nas próximas seções a metodologia desenvolvida para resolvê-las.

### 4.3 Subintervalos de queima

Os erros de cancelamento numérico resultantes do uso de soluções analíticas nos primeiros intervalos de queima podem ser reduzidos através da utilização dos

subintervalos de queima. Como vimos no Capítulo 2, apesar do cálculo de depleção apresentado nesta tese requerer a utilização de seções de choque microscópicas e fluxos médios nodalizados, nada exige que o intervalo de queima inteiro seja coberto por um único cálculo de depleção. Para obtermos vantagem dessa característica, os intervalos de queima serão divididos em subintervalos de queima que serão resolvidos sequencialmente.

Na seção 4.3.1 consideraremos as realimentações que ocorrem na cadeia da Figura 4.1, por meio de reações alfa como termos fonte apenas na parte corretora. Sendo assim, na parte preditora as únicas realimentações que consideraremos serão aquelas associadas aos acoplamentos via reações  $(n, 2n)$  que ocorrem entre os três primeiros actínídeos presentes no início da cadeia.

Na seção 4.3.2 abordaremos o problema de forma diferente, onde iremos tratar de todas as realimentações, por meio de reações  $(n, 2n)$  e decaimentos alfa, já na parte preditora. Portanto, a metodologia de desacoplamento das equações diferenciais, que na seção 4.3.1 é utilizada somente entre os três primeiros nuclídeos, será estendida para o restante da cadeia onde tais acoplamentos ocorrem.

### 4.3.1 Realimentações tratadas como fontes

Nesta seção, é proposta uma nova metodologia para o desacoplamento entre os três primeiros actínídeos, substituindo o desacoplamento proporcionado pela decomposição de matrizes (PRATA, 2013). Inicialmente, considere um intervalo de queima genérico  $[t_{\ell-1}, t_{\ell})$ , que seja dividido em  $n$  subintervalos idênticos, conforme a figura abaixo:

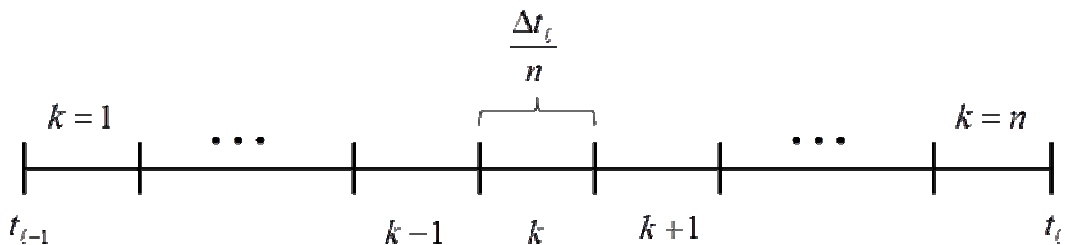


Figura 4.2: Subintervalos de queima

Em cada um desses subintervalos de queima, iremos aplicar um método de desacoplamento para somente duas equações, fazendo a aproximação de que o termo que se conecta à terceira equação será mantido constante ao longo do subintervalo de queima, sendo tratado como fonte da equação desacoplada. Sendo assim, para um subintervalo genérico  $k$ , as equações consideradas para os três primeiros nuclídeos serão:

$$\frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t) {}_k N_1^n(t) + h_{12}^n(t) {}_k N_2^n(t) \quad (4.20)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = h_{21}^n(t) {}_k N_1^n(t) + h_{22}^n(t) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t) {}_k N_3^n(t) \quad (4.21)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_3^n(t) = h_{33}^n(t) {}_k N_3^n(t) + h_{32}^n(t) {}_k N_2^n(t) \quad (4.22)$$

onde:

${}_k N_i^n(t) \equiv$  Concentração isotópica do nuclídeo  $i$  no subintervalo  $k$ .

Assim, primeiro calcularemos as concentrações isotópicas dos nuclídeos descritos pelas duas equações acopladas e em seguida a concentração do nuclídeo governado pela equação desacoplada. No restante da cadeia teremos soluções analíticas. Para isso, resolveremos as equações (4.20) a (4.22) em dois momentos distintos: subintervalos ímpares e subintervalos pares. Inicialmente, para subintervalos ímpares, desacoplaremos as equações (4.20) e (4.21), e trataremos a equação (4.22) separadamente. Posteriormente, para subintervalos pares, desacoplaremos as equações (4.21) e (4.22), lidando com a equação (4.20) de forma desvinculada das outras duas equações.

#### 4.3.1.1 Preditor -Subintervalo ímpar

O sistema de equações que descreve as concentrações isotópicas dos dois primeiros actínídeos será dado por

$$\frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(t) + h_{12}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) \quad (4.23)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(t) + h_{22}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \quad , \quad (4.24)$$

onde

${}_k N_i^n(0) \equiv$  Concentração isotópica inicial do nuclídeo  $i$  no subintervalo  $k$ .

Convém ressaltar que, para  $k=1$ , teremos  ${}_k N_i^n(0) = N_i^n(t_{\ell-1})$ . Agora, definindo as matrizes de concentração isotópica, concentração isotópica inicial e fonte

$$\tilde{N} \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_1^n(t) \\ {}_k N_2^n(t) \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

$$\tilde{N}^0 \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_1^n(0) \\ {}_k N_2^n(0) \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

$$\tilde{F} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \end{bmatrix} \quad , \quad (4.27)$$

e a matriz dos coeficientes

$$\tilde{E} = \begin{pmatrix} h_{11}^n(t_{\ell-1}) & h_{12}^n(t_{\ell-1}) \\ h_{21}^n(t_{\ell-1}) & h_{22}^n(t_{\ell-1}) \end{pmatrix} \quad , \quad (4.28)$$

podemos reescrever as equações (4.23) e (4.24) como

$$\tilde{N}' = \tilde{E}\tilde{N} + \tilde{F} \quad . \quad (4.29)$$

Para resolvermos a equação (4.29), considere a seguinte transformação de coordenadas (LARSEN, JENSEN, 1989)

$$\tilde{N} = \beta \tilde{\xi} - \tilde{E}^{-1} \tilde{F} \quad , \quad (4.30)$$

onde  $\beta$  é a solução do seguinte problema de valor inicial

$$\beta' = \alpha\beta \quad (4.31)$$

$$\beta(0) = 1 \quad , \quad (4.32)$$

sendo  $\alpha$  constante. Ou seja,  $\beta$  é a própria matriz exponencial:

$$\beta(t) = e^{\alpha t} \quad (4.33)$$

Considerando a equação (4.30) em  $t = 0$ :

$$\tilde{N}^0 = \tilde{N}(0) = \beta(0)\tilde{\xi}(0) - \tilde{E}^{-1}\tilde{F} = \tilde{\xi}(0) + \tilde{E}^{-1}\tilde{F} \quad (4.34)$$

Derivando a equação (4.30):

$$\tilde{N}' = \beta\xi' + \beta\xi \quad (4.35)$$

Levando a equação (4.30) em (4.29) :

$$\tilde{N}' = \tilde{E}\tilde{N}' + \tilde{F}' = \tilde{E}\beta\xi' - \tilde{E}\tilde{E}^{-1}\tilde{F}' + \tilde{F}' = \tilde{E}\beta\xi' \quad (4.36)$$

Podemos igualar as equações (4.35) e (4.36) e usarmos a equação (4.31) para chegarmos a:

$$\beta\xi' + \alpha\beta\xi = \tilde{E}\beta\xi' \quad (4.37)$$

ou seja:

$$\xi' = (\tilde{E} - \alpha\tilde{I})\xi \quad (4.38)$$

onde  $\tilde{I}$  é a matriz unitária. Para resolvermos a equação (4.38), faremos uso do seguinte teorema, válido para uma matriz de ordem  $2 \times 2$ :

*Teorema:* Se  $\tilde{A}$  é uma matriz com traço nulo, então a matriz  $-\tilde{A}^2$  será igual ao determinante de  $\tilde{A}$  vezes a matriz identidade, ou seja:

$$-\tilde{A}^2 = (\det \tilde{A})\tilde{I}$$

Assim, definindo a matriz  $\tilde{B}$  como

$$\tilde{B} = \tilde{E} - \alpha\tilde{I} \quad (4.39)$$

a ideia será escolhermos um valor adequado para  $\alpha$  de tal modo que a matriz  $\tilde{B}$  tenha traço nulo. Definindo  $\alpha$  como

$$\alpha = \frac{h_{11}^n(t_{\ell-1}) + h_{22}^n(t_{\ell-1})}{2} \quad (4.40)$$

teremos:

$$\tilde{B} = \begin{pmatrix} \frac{h_{11}^n(t_{\ell-1}) - h_{22}^n(t_{\ell-1})}{2} & h_{12}^n(t_{\ell-1}) \\ h_{21}^n(t_{\ell-1}) & \frac{-h_{11}^n(t_{\ell-1}) + h_{22}^n(t_{\ell-1})}{2} \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

Derivando a equação (4.38) :

$$\tilde{\xi}'' = \tilde{B}\tilde{\xi}' = \tilde{B}\tilde{B}\tilde{\xi} = \tilde{B}^2\tilde{\xi} \quad (4.42)$$

Definindo,

$$\Delta \equiv -\det \tilde{B} = \left( \frac{h_{11}^n(t_{\ell-1}) - h_{22}^n(t_{\ell-1})}{2} \right)^2 + h_{12}^n(t_{\ell-1})h_{21}^n(t_{\ell-1}) \quad (4.43)$$

podemos reescrever a equação (4.42), usando o teorema acima descrito, da seguinte forma:

$$\tilde{\xi}'' = \Delta\tilde{I}\tilde{\xi} = \Delta\tilde{\xi} \quad (4.44)$$

Agora, seja  $\gamma$  a solução para o problema de valor inicial dado por:

$$\gamma'' = \Delta\gamma \quad (4.45)$$



$$\gamma(0) = 0 \quad \gamma'(0) = 1 \quad (4.46)$$

Sendo assim, a solução para a equação (4.45) será dada pela seguinte expressão:

$$\gamma(t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \sinh(\sqrt{\Delta}t) & \text{para } \Delta > 0 \\ t & \text{para } \Delta = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \sin(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } \Delta < 0 \end{cases} \quad (4.47)$$

Pela equação (4.45), podemos perceber que, pelo fato de  $\gamma'$  não ser múltiplo constante de  $\gamma$ , podemos dizer que essas funções são linearmente independentes. Sendo assim, utilizando essas funções, podemos constituir uma base linearmente independente para a solução da equação (4.44). Sendo assim, como  $\tilde{\xi}$  resolve a equação (4.44), esta matriz deverá ser da forma:

$$\tilde{\xi} = \gamma' \tilde{V} + \gamma \tilde{W} \quad (4.48)$$

Derivando a equação acima:

$$\tilde{\xi}' = \gamma'' \tilde{V} + \gamma' \tilde{W} = \tilde{B} \tilde{\xi} \quad (4.49)$$

Levando (4.48) em (4.49):

$$\tilde{\xi}' = \gamma' \tilde{B} \tilde{V} + \gamma \tilde{B} \tilde{W} \quad (4.50)$$

Igualando as equações (4.49) e (4.50) :

$$\gamma'' \tilde{V} + \gamma' \tilde{W} = \gamma' \tilde{B} \tilde{V} + \gamma \tilde{B} \tilde{W} \quad (4.51)$$

Levando (4.45) em (4.51) :

$$\Delta \gamma \tilde{V} + \gamma' \tilde{W} = \gamma' \tilde{B} \tilde{V} + \gamma \tilde{B} \tilde{W} \quad (4.52)$$

Em  $t = 0$ :

$$\Delta\gamma(0)\tilde{V} + \gamma'(0)\tilde{W} = \gamma'(0)\tilde{B}\tilde{V} + \gamma(0)\tilde{B}\tilde{W} \quad (4.53)$$

Usando as condições iniciais dadas por (4.46) :

$$\tilde{W} = \tilde{B}\tilde{V} \quad (4.54)$$

Levando (4.54) em (4.48) :

$$\tilde{\xi} = \gamma'\tilde{V} + \gamma\tilde{B}\tilde{V} = \gamma'\tilde{I}\tilde{V} + \gamma\tilde{B}\tilde{V} = (\gamma'\tilde{I} + \gamma\tilde{B})\tilde{V} \quad (4.55)$$

Para  $t = 0$  a equação acima se torna:

$$\tilde{\xi}^0 = \tilde{\xi}(0) = (\gamma'(0)\tilde{I} + \gamma(0)\tilde{B})\tilde{V} = (1\tilde{I} + 0\tilde{B})\tilde{V} = \tilde{V} \quad (4.56)$$

Sendo assim, a solução para  $\tilde{\xi}$  será da forma:

$$\tilde{\xi} = (\gamma'\tilde{I} + \gamma\tilde{B})\tilde{\xi}^0 \quad (4.57)$$

Usando a equação (4.39) em (4.57) :

$$\tilde{\xi} = [\gamma'\tilde{I} + \gamma(\tilde{E} - \alpha\tilde{I})]\tilde{\xi}^0 \quad (4.58)$$

Levando (4.58) em (4.30) :

$$\tilde{N} = \beta[\gamma'\tilde{I} + \gamma(\tilde{E} - \alpha\tilde{I})]\tilde{\xi}^0 - \tilde{E}^{-1}\tilde{F} \quad (4.59)$$

Por fim, usando (4.34), chegamos a :

$$\tilde{N} = \beta[\gamma'\tilde{I} + \gamma(\tilde{E} - \alpha\tilde{I})](\tilde{N}^0 - \tilde{E}^{-1}\tilde{F}) - \tilde{E}^{-1}\tilde{F} \quad (4.60)$$

ou seja:

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} {}_k N_1^n(t) \\ {}_k N_2^n(t) \end{bmatrix} &= \beta \left\{ \gamma' \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \gamma \left( \begin{bmatrix} h_{11}^n(t_{\ell-1}) & h_{12}^n(t_{\ell-1}) \\ h_{21}^n(t_{\ell-1}) & h_{22}^n(t_{\ell-1}) \end{bmatrix} - \alpha \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right) \right\} \times \\
&\quad \left( \begin{bmatrix} {}_k N_1^n(0) \\ {}_k N_2^n(0) \end{bmatrix} - \delta \begin{bmatrix} h_{22}^n(t_{\ell-1}) & -h_{12}^n(t_{\ell-1}) \\ -h_{21}^n(t_{\ell-1}) & h_{11}^n(t_{\ell-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \end{bmatrix} \right) \\
&\quad - \delta \begin{bmatrix} h_{22}^n(t_{\ell-1}) & -h_{12}^n(t_{\ell-1}) \\ -h_{21}^n(t_{\ell-1}) & h_{11}^n(t_{\ell-1}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \end{bmatrix} \quad (4.61)
\end{aligned}$$

onde:

$$\delta = \frac{1}{h_{11}^n(t_{\ell-1})h_{22}^n(t_{\ell-1}) - h_{12}^n(t_{\ell-1})h_{21}^n(t_{\ell-1})} \quad (4.62)$$

Efetuando as respectivas multiplicações matriciais, chegamos às soluções das equações acopladas:

$$\begin{aligned}
{}_k N_1^{n,preditor}(t) &= \beta \left\{ \left[ \gamma' + \gamma \left( h_{11}^n(t_{\ell-1}) - \alpha \right) \right] \left( {}_k N_1^n(0) + \delta h_{12}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \right) \right. \\
&\quad \left. + \gamma h_{12}^n(t_{\ell-1}) \left( {}_k N_2^n(0) - \delta h_{11}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \right) \right\} \\
&\quad + \delta h_{12}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \quad (4.63)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
{}_k N_2^{n,preditor}(t) &= \beta \left\{ \gamma h_{21}^n(t_{\ell-1}) \left( {}_k N_1^n(0) + \delta h_{12}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \right) \right. \\
&\quad \left. + \left[ \gamma' + \gamma \left( h_{22}^n(t_{\ell-1}) - \alpha \right) \right] \left( {}_k N_2^n(0) - \delta h_{11}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \right) \right\} \\
&\quad - \delta h_{11}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \quad (4.64)
\end{aligned}$$

Definindo,

$$A \equiv h_{21}^n(t_{\ell-1}) \left( {}_k N_1^n(0) + \delta h_{12}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \right)$$

$$B \equiv h_{22}^n(t_{\ell-1}) - \alpha$$

$$C \equiv {}_k N_2^n(0) - \delta h_{11}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0)$$

$$D \equiv -\delta h_{11}^n(t_{\ell-1}) h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0)$$

a equação (4.64) torna-se:

$${}_k N_2^{n,preditor}(t) = \beta [\gamma(A+BC) + \gamma'C] + D = \gamma E + \gamma'H + D \quad , \quad (4.65)$$

onde

$$E \equiv \beta(A+BC)$$

e

$$H \equiv \beta C \quad .$$

A equação diferencial que rege a concentração isotópica do terceiro actínideo é dada por (4.22):

$$\frac{d}{dt} {}_k N_3^n(t) = h_{33}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(t) + h_{32}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t)$$

Levando (4.65) na equação acima:

$$\frac{d}{dt} {}_k N_3^n(t) = h_{33}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(t) + h_{32}^n(t_{\ell-1}) [\gamma E + \gamma'H + D] \quad (4.66)$$

A partir do terceiro nuclídeo, em virtude de não termos equações acopladas, podemos escrever uma solução geral analítica para o restante da cadeia. Para resolvermos as equações diferenciais de primeira ordem, adotaremos o método de solução que utiliza o fator integrante, ou seja, em primeiro lugar, multiplicamos as equações caracterizando os demais nuclídeos ( $i=3,4,\dots,17$ ) por  $\exp(-h_{ii}^n(t_{\ell-1})t)$ , e integramos cada termo de  $t_{\ell-1}$  até  $t$ . Após isso, resolvemos as integrais associadas a cada termo, tomando o cuidado para o fato de que algumas integrais dependerão da variável  $\Delta$ , necessitando da análise dos seus possíveis valores dados pela equação (4.47). Por fim, agrupamos os termos exponenciais. Após esse procedimento, chegamos às soluções das equações:

$${}_k N_i^{n,preditor}(t) = \sum_{j=1}^i a_{ij}^n \exp[h_{jj}^n(t-t_{\ell-1})] + F_i(t) \quad (4.67)$$

para  $i=3,4,\dots,17$ . Na equação (4.67), o termo  $F_i(t)$  será dado por:

$$F_i(t) = \sum_{m=1}^2 F_{im} \Psi_m(t) + F_{i3} \quad (4.68)$$

onde:

$$F_{i1} \equiv \begin{cases} \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})\left(\frac{E}{\sqrt{\Delta}} + H\right)}{2\left(\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n(t_{\ell})\right)} & \text{para } i=3; \Delta > 0 \\ -\frac{Eh_{ii}^n(t_{\ell-1})h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})}{\sqrt{-\Delta}\left(\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 - \Delta\right)} & \text{para } i=3; \Delta < 0 \\ -\frac{Eh_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=3; \Delta = 0 \\ \frac{F_{\alpha_i 2}h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1}) + F_{\beta_i 2}h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})}{\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=4,5,\dots,17; \Delta > 0 \\ -\frac{h_{ii}^n(t_{\ell-1})}{\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 - \Delta} \left( F_{\alpha_i 1} - F_{\alpha_i 2} \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \right) & \text{para } i=4,5,\dots,17; \Delta < 0 \\ -\frac{1}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} F_{\alpha_i 1} & \text{para } i=4,5,\dots,17; \Delta = 0 \end{cases} \quad (4.69)$$

$$F_{i2} \equiv \begin{cases} \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})\left(\frac{E}{\sqrt{\Delta}} - H\right)}{2\left(\sqrt{\Delta} + h_{ii}^n(t_\ell)\right)} & \text{para } i=3; \Delta > 0 \\ -\frac{Hh_{ii}^n(t_\ell)}{\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 + \Delta} & \text{para } i=3; \Delta < 0 \\ -\frac{H}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=3; \Delta = 0 \\ \frac{F_{\alpha_i 2} h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1}) + F_{\beta_i 2} h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})}{-\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=4,5,\dots,17; \Delta > 0 \\ -\frac{h_{ii}^n(t_{\ell-1})}{\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 - \Delta} \left( F_{\alpha_i 2} + F_{\alpha_i 1} \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \right) & \text{para } i=4,5,\dots,17; \Delta < 0 \\ -\frac{1}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \left( \frac{F_{\alpha_i 1}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} + F_{\alpha_i 2} \right) & \text{para } i=4,5,\dots,17; \Delta = 0 \end{cases} \quad (4.70)$$

$$F_{i3} \equiv \begin{cases} -\frac{Dh_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=3 \\ -\frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})F_{\alpha_i 3} + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})F_{\beta_i 3}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=4,5,\dots,17 \end{cases} \quad (4.71)$$

$$\Psi_1(t) \equiv \begin{cases} e^{\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i=3; \Delta > 0 \\ \text{sen}(\sqrt{-\Delta}t) + \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \cos(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } i=3; \Delta < 0 \\ t + \frac{1}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=3; \Delta = 0 \\ e^{\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i=4,5,\dots,17. \end{cases} \quad (4.72)$$

$$\Psi_2(t) \equiv \begin{cases} e^{-\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i=3; \Delta > 0 \\ \cos(\sqrt{-\Delta}t) - \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \text{sen}(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } i=3; \Delta < 0 \\ 1 & \text{para } i=3; \Delta = 0 \\ e^{-\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i=4,5,\dots,17. \end{cases} \quad (4.73)$$

$$a_{31}^n = a_{32}^n = 0$$

$$a_{ij}^n \equiv \begin{cases} k N_i^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})a_{\alpha_i j}^n + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})a_{\beta_i j}^n}{(h_{jj}^n(t_{\ell-1}) - h_{ii}^n(t_{\ell-1}))} - F_i(t_{\ell-1}) & \text{para } j=i \\ \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})a_{\alpha_i j}^n + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})a_{\beta_i j}^n}{(h_{jj}^n(t_{\ell-1}) - h_{ii}^n(t_{\ell-1}))} & \text{para } j < i \end{cases} \quad (4.74)$$

e  $F_{0m} = F_{03} = h_{i0}^n = h_{3\alpha_i}^n = h_{3\beta_i}^n = 0$ . Os termos  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  são dados de acordo com a Tabela 4.3:

Tabela 4.3: Variáveis presentes no termo  $F_i(t)$

Nuclídeos ( <i>i</i> )	Variáveis		
	$\alpha_i$	$\beta_i$	$\mu_i$
1	2	0	6
2	1	0	3
3	2	0	0
4	0	0	0
5	3	4	0
6	5	0	16
7	0	0	0
8	6	7	0
9	8	0	17
10	9	0	0
11	10	0	0
12	11	0	0
13	12	11	0
14	10	0	0
15	14	12	0
16	13	0	0

Sendo assim, de posse das equações caracterizando os nuclídeos, as concentrações serão calculadas no final do primeiro subintervalo de queima, e serão consideradas as concentrações iniciais do próximo subintervalo de queima. Ou seja, para um subintervalo genérico  $k$ , valerá a relação:

$${}_k N_i^{n,preditor}(0) = {}_{k-1} N_i^{n,preditor}\left(t_{\ell-1} + (k-1)\frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \quad ; \quad i=1,2,3. \quad (4.75)$$

onde:

${}_k N_i^{n,preditor}(0) \equiv$  Concentração inicial do nuclídeo  $i$  no subintervalo  $k$ .

${}_{k-1} N_i^{n,preditor}\left(t_{\ell-1} + (k-1)\frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \equiv$  Concentração final do nuclídeo  $i$  no subintervalo  $k-1$ .

$k = 2, 3, \dots, n$ .

Convém observar que esse procedimento de atribuição da concentração isotópica inicial do subintervalo seguinte será repetido para os subintervalos pares e ímpares, nas partes preditora e corretora.

#### 4.3.1.2 Preditor -Subintervalo par

Agora, considerando subintervalos pares de queima, as equações que descrevem os três primeiros actínídeos serão dadas por:

$$\frac{d}{{dt}} {}_k N_1^n = h_{11}^n(t_{\ell-1})_k N_1^n(t) + h_{12}^n(t_{\ell-1})_k N_2^n(0) \quad (4.76)$$

$$\frac{d}{{dt}} {}_k N_2^n = h_{22}^n(t_{\ell-1})_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_{\ell-1})_k N_3^n(t) + h_{21}^n(t_{\ell-1})_k N_1^n(0) \quad (4.77)$$

$$\frac{d}{{dt}} {}_k N_3^n = h_{32}^n(t_{\ell-1})_k N_2^n(t) + h_{33}^n(t_{\ell-1})_k N_3^n(t) \quad (4.78)$$

onde  ${}_k N_i^n(0)$  é dado por (4.75). Considerando somente os dois últimos actínídeos, cujas equações estão acopladas:



$$\frac{d}{dt} {}_k N_2^n = h_{22}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(t) + h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_3^n = h_{32}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) + h_{33}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(t)$$

Definindo as matrizes de concentração e fonte,

$$\tilde{N} \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_2^n(t) \\ {}_k N_3^n(t) \end{bmatrix} \quad (4.79)$$

$$\tilde{N}^0 \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_2^n(0) \\ {}_k N_3^n(0) \end{bmatrix} \quad (4.80)$$

$$\tilde{F} \equiv \begin{bmatrix} h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.81)$$

e a matriz dos coeficientes,

$$\tilde{E} = \begin{pmatrix} h_{22}^n(t_{\ell-1}) & h_{23}^n(t_{\ell-1}) \\ h_{32}^n(t_{\ell-1}) & h_{33}^n(t_{\ell-1}) \end{pmatrix} \quad (4.82)$$

podemos reescrever as equações (4.77) e (4.78) como:

$$\tilde{N}' = \tilde{E}\tilde{N} + \tilde{F} \quad (4.83)$$

De maneira análoga ao que fizemos anteriormente, para intervalos ímpares, a solução para a equação (4.83) será:

$$\tilde{N} = \beta \left[ \gamma' \tilde{I} + \gamma (\tilde{E} - \alpha \tilde{I}) \right] \left( \tilde{N}^0 - \tilde{E}^{-1} \tilde{F} \right) - \tilde{E}^{-1} \tilde{F} \quad (4.84)$$

onde:

$$\alpha = \frac{h_{22}^n(t_{\ell-1}) + h_{33}^n(t_{\ell-1})}{2} \quad (4.85)$$

$$\beta(t) = e^{\alpha t} \quad (4.86)$$

$$\Delta = \left( \frac{h_{22}^n(t_{\ell-1}) - h_{33}^n(t_{\ell-1})}{2} \right)^2 + h_{23}^n(t_{\ell-1})h_{32}^n(t_{\ell-1}) \quad (4.87)$$

$$\gamma(t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \sinh(\sqrt{\Delta}t) & \text{para } \Delta > 0 \\ t & \text{para } \Delta = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \sin(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } \Delta < 0 \end{cases} \quad (4.88)$$

Fazendo as respectivas operações matriciais na equação (4.84), chegamos às soluções das equações acopladas:

$$\begin{aligned} {}_k N_2^{n,preditor}(t) = & \beta \left\{ \left[ \gamma' + \gamma \left( h_{22}^n(t_{\ell-1}) - \alpha \right) \right] \left[ {}_k N_2^n(0) - \delta h_{33}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \right] \right. \\ & + \left[ \gamma h_{23}^n(t_{\ell-1}) \right] \left[ {}_k N_3^n(0) + \delta h_{32}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \right] \\ & \left. - \delta h_{33}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \right\} \end{aligned} \quad (4.89)$$

$$\begin{aligned} {}_k N_3^{n,preditor}(t) = & \beta \left\{ \left[ \gamma h_{32}^n(t_{\ell-1}) \right] \left[ {}_k N_2^n(0) - \delta h_{33}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \right] \right. \\ & + \left[ \gamma' + \gamma \left( h_{33}^n(t_{\ell-1}) - \alpha \right) \right] \left[ {}_k N_3^n(0) + \delta h_{32}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \right] \\ & \left. + \delta h_{32}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \right\} \end{aligned} \quad (4.90)$$

onde:

$$\delta = \frac{1}{h_{22}^n(t_{\ell-1})h_{33}^n(t_{\ell-1}) - h_{23}^n(t_{\ell-1})h_{32}^n(t_{\ell-1})} \quad (4.91)$$

Definindo,

$$A \equiv h_{32}^n(t_{\ell-1}) \left( {}_k N_2^n(0) - \delta h_{33}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \right)$$

$$B \equiv h_{33}^n(t_{\ell-1}) - \alpha$$

$$C \equiv {}_k N_3^n(0) + \delta h_{32}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0)$$

$$D \equiv \delta h_{32}^n(t_{\ell-1}) h_{21}^n(t_{\ell-1})_{k+1} N_1^n(0)$$

a equação (4.90) torna-se:

$${}_k N_3^{n,preditor}(t) = \beta [\gamma(A+BC) + \gamma'C] + D = \gamma E + \gamma'H + D \quad (4.92)$$

onde:

$$E \equiv \beta(A+BC)$$

$$H \equiv \beta C$$

A equação (4.76) descreve a equação diferencial que rege a concentração do primeiro actínideo

$$\frac{d}{{dt}} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_{\ell-1})_k N_1^n(t) + F \quad ,$$

onde

$$F = h_{12}^n(t_{\ell-1})_k N_2^n(0) \quad . \quad (4.93)$$

A solução da equação (4.76) será dada por:

$${}_k N_1^{n,preditor}(t) = \left[ {}_k N_1^n(t_{\ell-1}) + \frac{F}{h_{11}^n(t_{\ell-1})} \right] e^{h_{11}^n(t_{\ell-1})[t-t_{\ell-1}]} - \frac{F}{h_{11}^n(t_{\ell-1})} \quad (4.94)$$

Com as concentrações isotópicas dos três primeiros actínideos calculadas, será possível calcularmos as concentrações referentes aos nuclídeos que compõem o restante da cadeia, cuja solução será dada, de forma genérica, por

$${}_k N_i^{n,preditor}(t) = \sum_{j=1}^i a_{ij}^n \exp[h_{jj}^n(t-t_{\ell-1})] + F_i(t) \quad , \quad (4.95)$$

para  $i = 4, 5, \dots, 17$ . O termo  $F_i(t)$  será dado por:

$$F_i(t) = \sum_{m=1}^2 F_{im} \Psi_m(t) + F_{i3} \quad , \quad (4.96)$$

onde

$$F_{i1} \equiv \begin{cases} \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})\left(\frac{E}{\sqrt{\Delta}} + H\right)}{2\left(\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n(t_{\ell})\right)} & \text{para } i=5; \Delta > 0 \\ \\ \frac{Eh_{ii}^n(t_{\ell-1})h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})}{\sqrt{-\Delta}\left(\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 - \Delta\right)} & \text{para } i=5; \Delta < 0 \\ \\ \frac{Eh_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=5; \Delta = 0 \\ \\ \frac{F_{\alpha_i 2}h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1}) + F_{\beta_i 2}h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})}{\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i=4,6,\dots,17; \Delta > 0 \\ \\ \frac{h_{ii}^n(t_{\ell-1})}{\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 - \Delta} \left( F_{\alpha_i 1} - F_{\alpha_i 2} \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \right) & \text{para } i=4,6,\dots,17; \Delta < 0 \\ \\ -\frac{1}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} F_{\alpha_i 1} & \text{para } i=4,6,\dots,17; \Delta = 0 \end{cases} \quad (4.97)$$

$$F_{i2} \equiv \begin{cases} \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})\left(\frac{E}{\sqrt{\Delta}} - H\right)}{2\left(\sqrt{\Delta} + h_{ii}^n(t_{\ell})\right)} & \text{para } i = 5; \Delta > 0 \\ \frac{Hh_{ii}^n(t_{\ell})}{\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 + \Delta} & \text{para } i = 5; \Delta < 0 \\ \frac{H}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i = 5; \Delta = 0 \\ \frac{F_{\alpha_i 2} h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1}) + F_{\beta_i 2} h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})}{-\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i = 4, 6, \dots, 17; \Delta > 0 \\ -\frac{h_{ii}^n(t_{\ell-1})}{\left[h_{ii}^n(t_{\ell-1})\right]^2 - \Delta} \left( F_{\alpha_i 2} + F_{\alpha_i 1} \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \right) & \text{para } i = 4, 6, \dots, 17; \Delta < 0 \\ -\frac{1}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \left( \frac{F_{\alpha_i 1}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} + F_{\alpha_i 2} \right) & \text{para } i = 4, 6, \dots, 17; \Delta = 0 \end{cases} \quad (4.98)$$

$$F_{i3} \equiv \begin{cases} -\frac{Dh_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i = 5 \\ -\frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})F_{\alpha_i 3} + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})F_{\beta_i 3}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i = 4, 6, \dots, 17. \end{cases} \quad (4.99)$$

$$\Psi_1(t) \equiv \begin{cases} e^{\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i = 5; \Delta > 0 \\ \text{sen}(\sqrt{-\Delta}t) + \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \cos(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } i = 5; \Delta < 0 \\ t + \frac{1}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} & \text{para } i = 5; \Delta = 0 \\ e^{\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i = 4, 6, \dots, 17. \end{cases} \quad (4.100)$$

$$\Psi_2(t) \equiv \begin{cases} e^{-\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i = 5; \Delta > 0 \\ \cos(\sqrt{-\Delta}t) - \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n(t_{\ell-1})} \text{sen}(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } i = 5; \Delta < 0 \\ 1 & \text{para } i = 5; \Delta = 0 \\ e^{-\sqrt{\Delta}t} & \text{para } i = 4, 6, \dots, 17. \end{cases} \quad (4.101)$$

$$a_{ij}^n \equiv \begin{cases} {}_k N_i^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})a_{\alpha_i,j}^n + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})a_{\beta_i,j}^n}{(h_{jj}^n(t_{\ell-1}) - h_{ii}^n(t_{\ell-1}))} - F_i(t_{\ell-1}) & \text{para } j = i \\ \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})a_{\alpha_i,j}^n + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})a_{\beta_i,j}^n}{(h_{jj}^n(t_{\ell-1}) - h_{ii}^n(t_{\ell-1}))} & \text{para } j < i \end{cases} \quad (4.102)$$

e  $F_{0m} = F_{03} = h_{i0}^n = h_{5\alpha_i}^n = 0$ .

Esse processo de alternância de cálculo das concentrações isotópicas entre os intervalos ímpares e os intervalos pares será efetuado até chegarmos ao final do intervalo de queima  $t_\ell$ , após o qual reiniciaremos a metodologia para a parte corretora.

### 4.3.1.3 Corretor -Subintervalo ímpar

As equações vistas anteriormente, ou seja, as equações (4.3) a (4.19), serão novamente calculadas utilizando os elementos da matriz de evolução calculados no instante  $t_\ell$ . Nesta parte corretora, será considerada a realimentação por decaimento alfa, que será tratada como termo fonte. Assim, considerando os três primeiros núclídeos, para um subintervalo genérico  $k$ :

$$\frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t)_k N_1^n(t) + h_{12}^n(t)_k N_2^n(t) + h_{16}^n(t)_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \quad (4.103)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = h_{21}^n(t_\ell)_k N_1^n(t) + h_{22}^n(t_\ell)_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_\ell) N_3^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \quad (4.104)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_3^n(t) = h_{33}^n(t_\ell)_k N_3^n(t) + h_{32}^n(t_\ell)_k N_2^n(t) \quad (4.105)$$

onde:

${}_k N_i^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \equiv$  Concentração isotópica no final do subintervalo de queima, calculada na parte preditora, do nuclídeo  $i$  no subintervalo  $k$ .

$k = 1, 2, 3, \dots, n$ .

Assim, considerando apenas os dois primeiros actínídeos, podemos definir as matrizes,

$$\tilde{N} \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_1^n(t) \\ {}_k N_2^n(t) \end{bmatrix} \quad (4.106)$$

$$\tilde{N}^0 \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_1^n(0) \\ {}_k N_2^n(0) \end{bmatrix} \quad (4.107)$$

$$\tilde{F} \equiv \begin{bmatrix} h_{16}^n(t_\ell)_k N_6^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \\ h_{23}^n(t_\ell)_k N_3^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \end{bmatrix} \quad (4.108)$$

$$\tilde{E} \equiv \begin{pmatrix} h_{11}^n(t_\ell) & h_{12}^n(t_\ell) \\ h_{21}^n(t_\ell) & h_{22}^n(t_\ell) \end{pmatrix} \quad (4.109)$$

Utilizando as definições acima, podemos reescrever as equações (4.103) e (4.104) como:

$$\tilde{N}' = \tilde{E} \tilde{N} + \tilde{F} \quad (4.110)$$

Comparando as equações (4.29) e (4.110), notamos que elas apresentam a mesma estrutura, diferindo apenas em relação ao termo fonte. Sendo assim, a metodologia de resolução da equação acima será idêntica à apresentada para a equação (5.8). Com o

intuito de evitarmos repetições desnecessárias, apresentaremos a solução, omitindo os passos do cálculo:

$$\tilde{N} = \beta \left[ \gamma' \tilde{I} + \gamma (\tilde{E} - \alpha \tilde{I}) \right] \left( \tilde{N}^0 - \tilde{E}^{-1} \tilde{F} \right) - \tilde{E}^{-1} \tilde{F} \quad (4.111)$$

cuja solução será dada por:

$$\begin{aligned} {}_k N_1^{n,corretor}(t) = & \beta \left\{ \left[ \gamma' + \gamma \left( h_{11}^n(t_\ell) - \alpha \right) \right] \left( {}_k N_1^n(0) - \delta h_{22}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \delta h_{12}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right) \right. \\ & \left. + \gamma h_{12}^n(t_\ell) \left( {}_k N_2^n(0) + \delta h_{21}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \delta h_{11}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right) \right\} \\ & - \delta h_{22}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) + \delta h_{12}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \quad (4.112) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} {}_k N_2^{n,corretor}(t) = & \beta \left\{ \gamma h_{21}^n(t_\ell) \left( {}_k N_1^n(0) - \delta h_{22}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \delta h_{12}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right) \right. \\ & \left. + \left[ \gamma' + \gamma \left( h_{22}^n(t_\ell) - \alpha \right) \right] \left( {}_k N_2^n(0) + \delta h_{21}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right. \right. \\ & \left. \left. - \delta h_{11}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right) \right\} \\ & + \delta h_{21}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) - \delta h_{11}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \quad (4.113) \end{aligned}$$

Definindo,

$$A \equiv h_{21}^n(t_\ell) \left( {}_k N_1^n(0) - \delta h_{22}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) + \delta h_{12}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right)$$

$$B \equiv h_{22}^n(t_\ell) - \alpha$$

$$C \equiv \left( {}_k N_2^n(0) + \delta h_{21}^n(t_\ell) h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) - \delta h_{11}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right)$$



$$D \equiv \delta h_{21}^n(t_\ell) h_{46}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) - \delta h_{11}^n(t_\ell) h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right)$$

a equação (4.113) torna-se:

$${}_k N_2^{n,corretor}(t) = \beta \left[ \gamma(A + BC) + \gamma' C \right] + D = \gamma E + \gamma' H + D \quad (4.114)$$

onde:

$$E \equiv \beta(A + BC)$$

$$H \equiv \beta C$$

Considerando que a partir do terceiro nuclídeo os acoplamentos existentes por meio de decaimentos alfa serão tratados como termos fontes, podemos escrever, utilizando o procedimento explicitado anteriormente na parte preditor, uma solução geral para o restante da cadeia, da seguinte forma:

$${}_k N_i^{n,corretor}(t) = \sum_{j=1}^i a_{ij}^n \exp \left[ h_{jj}^n(t - t_{\ell-1}) \right] + F_i(t) \quad (4.115)$$

para  $i = 3, 4, \dots, 17$ . Na equação (4.115), o termo  $F_i(t)$  será dado por:

$$F_i(t) = \sum_{m=1}^2 F_{im} \Psi(t) + F_{i3} \quad (4.116)$$

onde:

$$F_{i3}(t) \equiv \begin{cases} \frac{D h_{i\alpha_i}^n(t_\ell)}{h_{ii}^n(t_\ell)} & ; \text{ para } i = 3 \\ \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_\ell) F_{\alpha_i 3} + h_{i\beta_i}^n(t_\ell) F_{\beta_i 3} + h_{i\mu_i}^n(t_\ell) {}_k N_{\mu_i}^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right)}{h_{ii}^n(t_\ell)} & ; i = 4, 5, \dots, 17 \end{cases} \quad (4.117)$$

$$a_{31}^n = a_{32}^n = 0$$

e  $F_{0m} = F_{03} = h_{i0}^n = {}_k N_0^{n,preditor}(t_\ell) = h_{3\alpha_i}^n = h_{3\beta_i}^n = 0$ . O termo  $\mu_i$  pode ser encontrado na Tabela 4.3. Os demais termos,  $F_{im}^n$ ,  $\Psi_m(t)$  e  $a_{ij}^n$ , serão semelhantes àqueles apresentados na parte preditora, intervalo ímpar, com a distinção de que as seções de choque microscópicas serão dadas pelo seu valor no final do intervalo de queima, ou seja, serão expressas por  $h_{ij}^n(t_\ell)$ .

#### 4.3.1.4 Corretor -Subintervalo par

Considerando os três primeiros núclídeos, as suas respectivas equações serão:

$$\frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_\ell) {}_k N_1^n(t) + h_{12}^n(t_\ell) {}_k N_2^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) + h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \quad (4.118)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = +h_{22}^n(t_\ell) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^n(t) + h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \quad (4.119)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_3^n(t) = h_{32}^n(t_\ell) {}_k N_2^n(t) + h_{33}^n(t_\ell) {}_k N_3^n(t) \quad (4.120)$$

onde:

${}_k N_i^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \equiv$  Concentração isotópica no final do subintervalo de queima, calculada na parte preditora, do núclídeo  $i$  no subintervalo  $k$ .

$k = 1, 2, 3, \dots, n$ .

No subintervalo par, como já tínhamos considerado, analisaremos inicialmente somente os dois actínídeos cujas equações estão acopladas:

$$\frac{d}{dt} {}_k N_2^n = h_{22}^n(t_\ell) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^n(t) + h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right)$$

$$\frac{d}{dt} {}_k N_3^n = h_{32}^n(t_\ell) {}_k N_2^n(t) + h_{33}^n(t_\ell) {}_k N_3^n(t)$$

Definindo as matrizes,

$$\tilde{N} \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_2^n(t) \\ {}_k N_3^n(t) \end{bmatrix} \quad (4.121)$$

$$\tilde{N}^0 \equiv \begin{bmatrix} {}_k N_2^n(0) \\ {}_k N_3^n(0) \end{bmatrix} \quad (4.122)$$

$$\tilde{F} \equiv \begin{bmatrix} h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4.123)$$

$$\tilde{E} \equiv \begin{pmatrix} h_{22}^n(t_\ell) & h_{23}^n(t_\ell) \\ h_{32}^n(t_\ell) & h_{33}^n(t_\ell) \end{pmatrix} \quad (4.124)$$

podemos reescrever as equações (4.121) e (4.122) como:

$$\tilde{N}' = \tilde{E}\tilde{N} + \tilde{F} \quad (4.125)$$

De maneira análoga à resolução já demonstrada, a solução para a equação (4.125) será:

$$\tilde{N} = \beta \left[ \gamma' \tilde{I} + \gamma(\tilde{E} - \alpha \tilde{I}) \right] \left( \tilde{N}^0 - \tilde{E}^{-1} \tilde{F} \right) - \tilde{E}^{-1} \tilde{F} \quad (4.126)$$

onde:

$$\alpha = \frac{h_{22}^n(t_\ell) + h_{33}^n(t_\ell)}{2} \quad (4.127)$$

$$\beta(t) = e^{\alpha t} \quad (4.128)$$

$$\Delta = \left( \frac{h_{22}^n(t_\ell) - h_{33}^n(t_\ell)}{2} \right)^2 + h_{23}^n(t_\ell) h_{32}^n(t_\ell) \quad (4.129)$$

$$\gamma(t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \sinh(\sqrt{\Delta}t) & \text{para } \Delta > 0 \\ t & \text{para } \Delta = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \sin(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } \Delta < 0 \end{cases} \quad (4.130)$$

Após algumas operações matriciais, obtemos as soluções das equações (4.119) e (4.120):

$$\begin{aligned} {}_k N_2^{n,corretor}(t) = & \beta \left\{ \left[ \gamma' + \gamma(h_{22}^n(t_\ell) - \alpha) \right] \left[ {}_k N_2^n(0) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \delta h_{33}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right] + \right. \\ & \left. + \left[ \gamma h_{23}^n(t_\ell) \right] \left[ {}_k N_3^n(0) + \delta h_{32}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right] \right\} - \\ & - \delta h_{33}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \end{aligned} \quad (4.131)$$

$$\begin{aligned} {}_k N_3^{n,corretor}(t) = & \beta \left\{ \left[ \gamma h_{32}^n(t_\ell) \right] \left[ {}_k N_2^n(0) - \delta h_{33}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right] + \right. \\ & \left. + \left[ \gamma' + \gamma(h_{33}^n(t_\ell) - \alpha) \right] \left[ {}_k N_3^n(0) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \delta h_{32}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right] \right\} + \\ & + \delta h_{32}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \end{aligned} \quad (4.132)$$

onde:

$$\delta = \frac{1}{h_{22}^n(t_\ell) h_{33}^n(t_\ell) - h_{23}^n(t_\ell) h_{32}^n(t_\ell)} \quad (4.133)$$

Definindo,

$$A \equiv h_{32}^n(t_\ell) \left( {}_k N_2^n(0) - \delta h_{33}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \right)$$

$$B \equiv h_{33}^n(t_{\ell-1}) - \alpha$$

$$C \equiv {}_k N_3^n(0) + \delta h_{32}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right)$$

$$D \equiv \delta h_{32}^n(t_\ell) h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right)$$

a equação (4.132) torna-se:

$${}_k N_3^{n,corrector}(t) = \beta \left[ \gamma(A + BC) + \gamma' C \right] + D = \gamma E + \gamma' H + D \quad (4.134)$$

onde:

$$E \equiv \beta(A + BC)$$

$$H \equiv \beta C$$

A equação (4.118) descreve a equação diferencial que rege a concentração do primeiro actínio:

$$\frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_\ell) {}_k N_1^n(t) + F$$

onde:

$$F = h_{12}^n(t_\ell) {}_k N_2^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) + h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) \quad (4.135)$$

A solução da equação (4.118) será dada por :

$${}_k N_1^{n,corrector}(t) = \left[ {}_k N_1^n(t_{\ell-1}) + \frac{F}{h_{11}^n(t_\ell)} \right] e^{h_{11}^n(t_\ell)[t-t_{\ell-1}]} - \frac{F}{h_{11}^n(t_\ell)} \quad (4.136)$$

Com as concentrações isotópicas dos três primeiros actínios calculadas, será possível calcularmos as concentrações referentes aos nuclídeos que compõem o restante da cadeia, cuja solução será dada, de forma genérica, por:

$${}_k N_i^{n,corrector}(t) = \sum_{j=1}^i a_{ij}^n \exp[h_{ij}^n(t-t_{\ell-1})] + F_i(t) \quad (4.137)$$

para  $i = 4, 5, \dots, 17$ . Na equação (4.137), o termo  $F_i(t)$  será dado por:

$$F_i(t) = \sum_{m=1}^2 F_{im} \Psi_m(t) + F_{i3} \quad (4.138)$$

onde:

$$F_{i3}(t) \equiv \begin{cases} \frac{Dh_{i\alpha_i}^n(t_\ell)}{h_{ii}^n(t_\ell)} & ; i = 5 \\ \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_\ell)F_{\alpha_i 3} + h_{i\beta_i}^n(t_\ell)F_{\beta_i 3} + h_{i\mu_i}^n(t_\ell) {}_k N_{\mu_i}^{n,preditor}(t_\ell)}{h_{ii}^n(t_\ell)} & ; i = 4, 6, \dots, 17. \end{cases} \quad (4.139)$$

e  $F_{0m} = F_{03} = h_{i0}^n = h_{5\alpha_i}^n = {}_k N_0^{n,preditor}(t_\ell) = 0$ . Os demais termos,  $F_{im}$ ,  $\Psi_m(t)$  e  $a_{ij}^n$  serão semelhantes àqueles apresentados na parte preditora, intervalo par, com a distinção de que as seções de choque microscópicas serão dadas pelo seu valor no final do intervalo de queima, ou seja, serão expressas por  $h_{ij}^n(t_\ell)$ .

### 4.3.2 Desacoplamento das Realimentações

Nesta seção, ao invés de tratarmos as realimentações por meio do decaimento alfa como termos fontes das equações diferenciais que caracterizam as concentrações isotópicas, utilizaremos a metodologia de desacoplamento descrita na seção 4.3.1. Além disso, consideraremos todos os acoplamentos que ocorrem na cadeia a partir da parte preditora. Pelas Figuras 4.3 e 4.4 podemos visualizar as cadeias que serão tratadas para intervalos ímpares e pares, respectivamente:

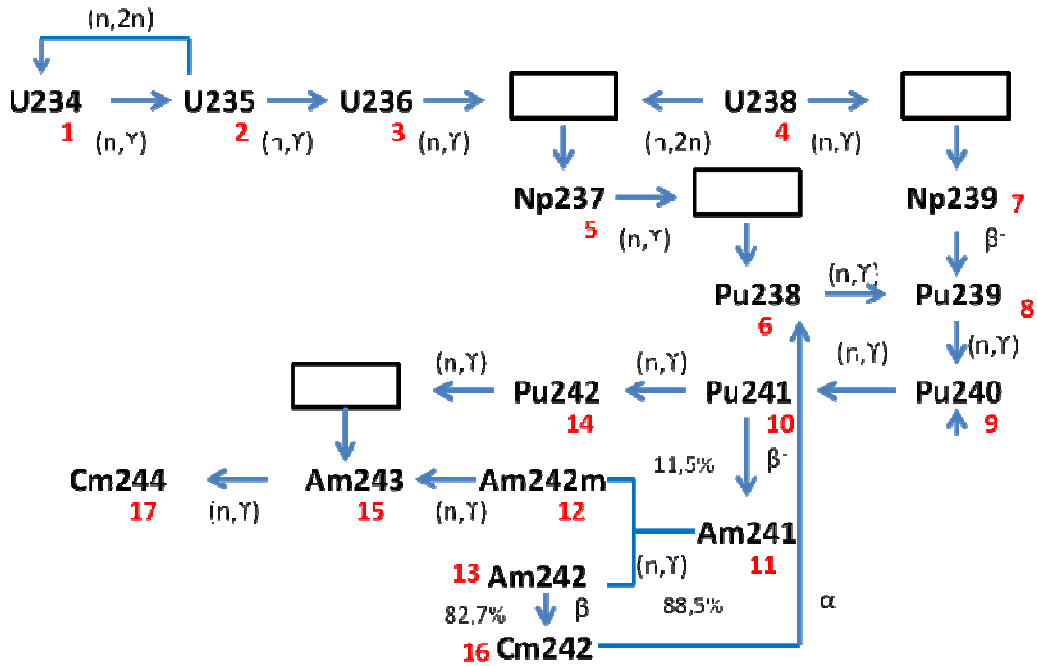


Figura 4.3: Intervalo ímpar

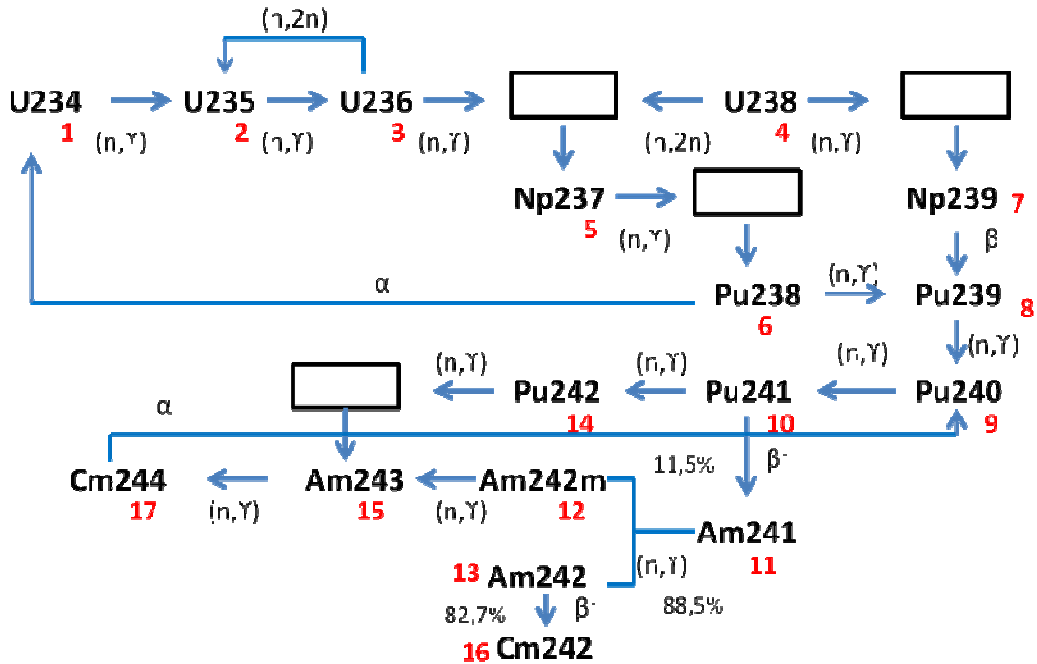


Figura 4.4: Intervalo par

Sendo assim, os sistemas de equações que teremos que resolver que apresentam o acoplamento serão:

**Preditor -Intervalo ímpar:**

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(t) + h_{12}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) + h_{16}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_6^n(0) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(t) + h_{22}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(0) \end{cases} \quad (4.140)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_6^n(t) = h_{66}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_6^n(t) + h_{616}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_{16}^n(t) + h_{65}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_5^n(0) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_{16}^n(t) = h_{1616}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_{16}^n(t) + h_{1613}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_{13}^n(0) \end{cases} \quad (4.141)$$

**Preditor-Intervalo par:**

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(t) + h_{16}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_6^n(t) + h_{12}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(0) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_6^n(t) = h_{66}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_6^n(t) + h_{65}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_5^n(0) + h_{616}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_{16}^n(0) \end{cases} \quad (4.142)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = h_{22}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(t) + h_{21}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_1^n(0) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_3^n(t) = h_{32}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_2^n(t) + h_{33}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_3^n(t) \end{cases} \quad (4.143)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_9^n(t) = h_{99}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_9^n(t) + h_{917}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_{17}^n(t) + h_{98}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_8^n(0) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_{17}^n(t) = h_{1717}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_{17}^n(t) + h_{1715}^n(t_{\ell-1}) {}_k N_{15}^n(0) \end{cases} \quad (4.144)$$

**Corretor -Intervalo ímpar:**

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_\ell) {}_k N_1^n(t) + h_{12}^n(t_\ell) {}_k N_2^n(t) + h_{16}^n(t_\ell) {}_k N_6^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = h_{21}^n(t_\ell) {}_k N_1^n(t) + h_{22}^n(t_\ell) {}_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_\ell) {}_k N_3^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \end{cases} \quad (4.145)$$



$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_6^n(t) = h_{66}^n(t_\ell)_k N_6^n(t) + h_{616}^n(t_\ell)_k N_{16}^n(t) + h_{65}^n(t_\ell)_k N_5^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_{16}^n(t) = h_{1616}^n(t_\ell)_k N_{16}^n(t) + h_{1613}^n(t_\ell)_k N_{13}^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \end{cases} \quad (4.146)$$

**Corretor-Intervalo par:**

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_1^n(t) = h_{11}^n(t_\ell)_k N_1^n(t) + h_{16}^n(t_\ell)_k N_6^n(t) + h_{12}^n(t_\ell)_k N_2^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_6^n(t) = h_{66}^n(t_\ell)_k N_6^n(t) + h_{65}^n(t_\ell)_k N_5^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) + h_{616}^n(t_\ell)_k N_{16}^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \end{cases} \quad (4.147)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_2^n(t) = h_{22}^n(t_\ell)_k N_2^n(t) + h_{23}^n(t_\ell)_k N_3^n(t) + h_{21}^n(t_\ell)_k N_1^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_3^n(t) = h_{32}^n(t_\ell)_k N_2^n(t) + h_{33}^n(t_\ell)_k N_3^n(t) \end{cases} \quad (4.148)$$

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_9^n(t) = h_{99}^n(t_\ell)_k N_9^n(t) + h_{917}^n(t_\ell)_k N_{17}^n(t) + h_{98}^n(t_\ell)_k N_8^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \\ \frac{d}{dt} {}_k N_{17}^n(t) = h_{1717}^n(t_\ell)_k N_{17}^n(t) + h_{1715}^n(t_\ell)_k N_{15}^{n,preditor} \left(k \frac{\Delta t_\ell}{n}\right) \end{cases} \quad (4.149)$$

onde  ${}_k N_i^n(0)$  pode assumir o valor da concentração inicial do subintervalo ou pode ser aproximado pelo valor nulo. As demais equações permanecerão iguais àquelas vistas na seção 4.3.1. Sendo assim, considerando os sistemas de equações (4.140) a (4.149), podemos perceber que todas as equações possuem termos fontes, exceto o terceiro nuclídeo nos sistemas de equações (4.143) e (4.148), caracterizados pelas concentrações dos nuclídeos calculadas no início de cada subintervalo de queima e na parte preditora, respectivamente. Visando uma leitura mais agradável do texto, evitaremos a repetição da análise da resolução, uma vez que já que foi feita na seção 4.3.1. Com o intuito de oferecer uma visão mais geral, iremos generalizar a resolução do sistema de duas equações acopladas, tomando por base as equações (4.103) e (4.104). Sendo assim, a generalização das equações (4.140) a (4.149), para intervalos pares e ímpares e para as partes preditora e corretora será dada por:

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} {}_k N_w^n(t) = h_{ww}^n {}_k N_w^n(t) + h_{ws}^n {}_k N_s^n(t) + h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n \\ \frac{d}{dt} {}_k N_s^n(t) = h_{sw}^n {}_k N_w^n(t) + h_{ss}^n {}_k N_s^n(t) + h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n \end{cases} \quad (4.150)$$

onde, para intervalos ímpares,  $w=1,6$ ,  $s=2,16$ ,  $\mu_w=5,6$ ,  $\mu_s=3,13$ ,  $\omega_s=0$  e, para intervalos pares,  $w=1,2,9$ ,  $s=3,6,17$ ,  $\mu_w=1,2,8$ ,  $\mu_s=5,15$  e  $\omega_s=16$ . Além disso, temos:

$$h_{ij}^n \equiv \begin{cases} h_{ij}^n(t_{\ell-1}) & ; \text{preditor} \\ h_{ij}^n(t_{\ell}) & ; \text{corretor} \end{cases} \quad (4.151)$$

$${}_k N_{X_Y}^n \equiv \begin{cases} {}_k N_{X_Y}^n(0) & ; \text{preditor} \\ {}_k N_{X_Y}^{n,\text{preditor}}\left(k \frac{\Delta t_{\ell}}{n}\right) & ; \text{corretor} \end{cases} \quad (4.152)$$

para  $X = \mu, \omega$  e  $Y = s, w$ .

A solução do sistema de equações dado por (4.150) será:

$$\begin{aligned} {}_k N_w^n(t) = & \beta \left\{ \left[ \gamma' + \gamma (h_{ww}^n - \alpha) \right] \left( {}_k N_w^n(0) - \delta h_{ss}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n + \right. \right. \\ & + \delta h_{ws}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n) \left. \right) + \\ & + \gamma h_{ws}^n \left( {}_k N_s^n(0) + \delta h_{sw}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n - \delta h_{ww}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n) \right) \left. \right\} - \\ & - \delta h_{ss}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n + \delta h_{ws}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n) \end{aligned} \quad (4.153)$$

$$\begin{aligned} {}_k N_s^n(t) = & \beta \left\{ \gamma h_{sw}^n \left( {}_k N_w^n(0) - \delta h_{ss}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n + \delta h_{ws}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n) \right) \right. \\ & + \left[ \gamma' + \gamma (h_{ss}^n - \alpha) \right] \left( {}_k N_s^n(0) + \delta h_{sw}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n - \right. \\ & \left. - \delta h_{ww}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n) \right) \left. \right\} \\ & + \delta h_{sw}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n - \delta h_{ww}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n) \end{aligned} \quad (4.154)$$

onde:

$$\beta(t) = e^{\alpha t} \quad (4.155)$$

$$\alpha = \frac{h_{ww}^n + h_{ss}^n}{2} \quad (4.156)$$

$$\gamma(t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Delta}} \sinh(\sqrt{\Delta}t) & \text{para } \Delta > 0 \\ t & \text{para } \Delta = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{-\Delta}} \sin(\sqrt{-\Delta}t) & \text{para } \Delta < 0 \end{cases} \quad (4.157)$$

$$\Delta \equiv \left( \frac{h_{ww}^n - h_{ss}^n}{2} \right)^2 + h_{ws}^n h_{sw}^n \quad (4.158)$$

$$\delta \equiv \frac{1}{h_{ww}^n h_{ss}^n - h_{ws}^n h_{sw}^n} \quad (4.159)$$

Para os demais núclídeos da cadeia, a solução geral terá a seguinte forma:

$${}_k N_i^n(t) = \sum_{j=1}^i a_{ij}^n \exp[h_{ij}^n(t-t_{\ell-1})] + F_i(t) \quad (4.160)$$

onde, para intervalos ímpares,  $i=3,4,5,7,\dots,15,17$  e, para intervalos pares,  $i=4,5,7,8,10,\dots,16$ .

O termo fonte  $F_i(t)$  será dado por:

$$F_i(t) = \sum_{m=1}^2 F_{im} \Psi_m(t) + F_{i3} \quad (4.161)$$

onde:

$$F_{i1} \equiv \left\{ \begin{array}{ll}
\frac{h_{i\alpha_i}^n \left( \frac{E}{\sqrt{\Delta}} + H \right)}{2(\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n)} & \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta > 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta > 0 \end{array} \\
-\frac{E h_{ii}^n h_{i\alpha_i}^n}{\sqrt{-\Delta} \left( [h_{ii}^n]^2 - \Delta \right)} & \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta < 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta < 0 \end{array} \\
-\frac{E h_{i\alpha_i}^n}{h_{ii}^n} & \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta = 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta = 0 \end{array} \\
\frac{F_{\alpha_1} h_{i\alpha_i}^n + F_{\beta_1} h_{i\beta_1}^n}{\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n} & \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15; \Delta > 0 \\ \text{int. } par : i = 4, 7, 11, \dots, 16; \Delta > 0 \end{array} \\
-\frac{h_{ii}^n}{[h_{ii}^n]^2 - \Delta} \left( F_{\alpha_1} - F_{\alpha_2} \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n} \right) & \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15; \Delta < 0 \\ \text{int. } par : i = 4, 7, 11, \dots, 16; \Delta < 0 \end{array} \\
-\frac{1}{h_{ii}^n} F_{\alpha_1} & \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15; \Delta = 0 \\ \text{int. } par : i = 4, 7, 11, \dots, 16; \Delta = 0 \end{array}
\end{array} \right. \quad (4.162)$$

$$F_{i2} \equiv \left\{ \begin{array}{l} \frac{h_{i\alpha_i}^n \left( \frac{E}{\sqrt{\Delta}} - H \right)}{2 \left( \sqrt{\Delta} + h_{ii}^n \right)} \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta > 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta > 0 \end{array} \\ \\ - \frac{H h_{ii}^n}{\left[ h_{ii}^n \right]^2 + \Delta} \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta < 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta < 0 \end{array} \\ \\ \frac{H}{h_{ii}^n} \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta = 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta = 0 \end{array} \\ \\ \frac{F_{\alpha_1} h_{i\alpha_i}^n + F_{\beta_1} h_{i\beta_i}^n}{-\sqrt{\Delta} - h_{ii}^n} \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15; \Delta > 0 \\ \text{int. } par : i = 4, 7, 11, \dots, 16; \Delta > 0 \end{array} \\ \\ - \frac{h_{ii}^n}{\left[ h_{ii}^n \right]^2 - \Delta} \left( F_{\alpha_2} + F_{\alpha_1} \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n} \right) \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15; \Delta < 0 \\ \text{int. } par : i = 4, 7, 11, \dots, 16; \Delta < 0 \end{array} \\ \\ - \frac{1}{h_{ii}^n} \left( \frac{F_{\alpha_1}}{h_{ii}^n} + F_{\alpha_2} \right) \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15; \Delta = 0 \\ \text{int. } par : i = 4, 7, 11, \dots, 16; \Delta = 0 \end{array} \end{array} \right. \quad (4.163)$$

$$\Psi_1(t) \equiv \left\{ \begin{array}{l} e^{\sqrt{\Delta}t} \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta > 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta > 0 \end{array} \\ \\ \text{sen}(\sqrt{-\Delta}t) + \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n} \cos(\sqrt{-\Delta}t) \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta < 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta < 0 \end{array} \\ \\ t + \frac{1}{h_{ii}^n} \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 3, 8, 17; \Delta = 0 \\ \text{int. } par : i = 5, 8, 10; \Delta = 0 \end{array} \\ \\ e^{\sqrt{\Delta}t} \quad \begin{array}{l} \text{int. } \dot{i}mpar : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15. \\ \text{int. } par : i = 4, 7, 11, \dots, 16. \end{array} \end{array} \right. \quad (4.164)$$

$$\Psi_2(t) \equiv \begin{cases} e^{-\sqrt{\Delta}t} & \text{int. } \textit{impar} : i = 3, 8, 17; \Delta > 0 \\ & \text{int. } \textit{par} : i = 5, 8, 10; \Delta > 0 \\ \cos(\sqrt{-\Delta}t) - \frac{\sqrt{-\Delta}}{h_{ii}^n} \text{sen}(\sqrt{-\Delta}t) & \text{int. } \textit{impar} : i = 3, 8, 17; \Delta < 0 \\ & \text{int. } \textit{par} : i = 5, 8, 10; \Delta < 0 \\ 1 & \text{int. } \textit{impar} : i = 3, 8, 17; \Delta = 0 \\ & \text{int. } \textit{par} : i = 5, 8, 10; \Delta = 0 \\ e^{-\sqrt{\Delta}t} & \text{int. } \textit{impar} : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15. \\ & \text{int. } \textit{par} : i = 4, 7, 11, \dots, 16. \end{cases} \quad (4.165)$$

$$F_{i3} \equiv \begin{cases} \frac{Dh_{i\alpha_i}^n}{h_{ii}^n} & \text{int. } \textit{impar} : i = 3, 8, 17 \\ & \text{int. } \textit{par} : i = 5, 8, 10 \\ \frac{h_{i\alpha_i}^n F_{\alpha_i 3} + h_{i\beta_i}^n F_{\beta_i 3} + h_{i\mu_i k}^n N_{\mu_i}^n}{h_{ii}^n} & \text{int. } \textit{impar} : i = 4, 5, 7, 9, \dots, 15. \\ & \text{int. } \textit{par} : i = 4, 7, 11, \dots, 16. \end{cases} \quad (4.166)$$

$${}_k N_{\mu_i}^n = \begin{cases} {}_k N_{\mu_i}^n(0) & ; \textit{preditor} \\ {}_k N_{\mu_i}^{\textit{preditor}} \left( k \frac{\Delta t_\ell}{n} \right) & ; \textit{corretor} \end{cases} \quad (4.167)$$

$$A \equiv h_{sw}^n \left( {}_k N_w^n(0) - \delta h_{ss}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n + \delta h_{ws}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n) \right)$$

$$B \equiv h_{ss}^n - \alpha$$

$$C \equiv {}_k N_s^n(0) + \delta h_{sw}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n - \delta h_{ww}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n)$$

$$D \equiv \delta h_{sw}^n h_{w\mu_w}^n {}_k N_{\mu_w}^n - \delta h_{ww}^n (h_{s\mu_s}^n {}_k N_{\mu_s}^n + h_{s\omega_s}^n {}_k N_{\omega_s}^n)$$

$$E \equiv \beta(A + BC)$$

$$H \equiv \beta C$$

$$a_{ij}^n \equiv \begin{cases} {}_k N_i^n(t_{\ell-1}) - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})a_{\alpha_i j}^n + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})a_{\beta_i j}^n}{(h_{jj}^n(t_{\ell-1}) - h_{ii}^n(t_{\ell-1}))} - F_i(t_{\ell-1}) & ; j = i \\ \frac{h_{i\alpha_i}^n(t_{\ell-1})a_{\alpha_i j}^n + h_{i\beta_i}^n(t_{\ell-1})a_{\beta_i j}^n}{(h_{jj}^n(t_{\ell-1}) - h_{ii}^n(t_{\ell-1}))} & ; j < i \end{cases} \quad (4.168)$$

e  $F_{0m} = F_{03} = h_{i0}^n = h_{3\alpha_i}^n = h_{3\beta_i}^n = h_{5\alpha_i}^n = {}_k N_0^{n.preditor} = 0$ . Os termos  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  e  $\mu_i$  são dados pela Tabela 4.3.

## 4.4 Esquema de acoplamento

Nos métodos apresentados nas seções 4.2 e 4.3, houve a utilização da metodologia de cálculo onde, na parte preditora, as concentrações foram obtidas com os parâmetros calculados no início do intervalo de queima  $t_{\ell-1}$ , e na parte corretora as concentrações foram obtidas com os parâmetros calculados no final do intervalo de queima  $t_\ell$ . A diferença entre os métodos se deu entre a forma como foram feitos os cálculos, mas todas elas tiveram por diretrizes gerais, o processo de cálculo preditor-corretor. Nesta seção vamos detalhar um pouco melhor essa metodologia de cálculo.

### **Preditor**

Vamos analisar um intervalo de queima genérico, digamos de  $t_{\ell-1}$  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 as reações de captura, fissão, transporte e espalhamento.

De posse das seções de choque macroscópicas  $\Sigma_{xg}^n(t_{\ell-1})$ , a equação de difusão estacionária é resolvida para obtermos 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

$$\frac{d}{dt} \tilde{N}^n(t) = \tilde{E}_\ell^n \tilde{N}^n(t), \quad t_{\ell-1} \leq t < t_\ell \quad (4.169)$$

os elementos da matriz de evolução  $E_\ell^n$  serão obtidos usando as seções de choque microscópicas  $\sigma_{xg}^i(t_{\ell-1})$ , as concentrações isotópicas  $N_i^n(t_{\ell-1})$  e os fluxos médios nos nodos  $\bar{\phi}_g^n(t_{\ell-1})$ , sendo estes normalizados à potência de operação. Para obtermos essa normalização, é considerado que durante a operação do reator o nível de potência seja mantido constante durante o intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_\ell]$ . A potência de operação do reator se relaciona com o fator de carga, através da seguinte expressão:

$$P_{\text{operação}}(t) = f_{\text{carga}}(t) P_{\text{nominal}} \quad (4.170)$$

onde  $0 \leq f_{\text{carga}}(t) \leq 1$  é o fator de carga (nível de potência) no intervalo  $[t_{\ell-1}, t_\ell]$ , e  $P_{\text{nominal}}$  é a potência do projeto do reator. Em caráter exemplificativo, a variação do fator de carga com o tempo pode ser visto na Figura 4.4:

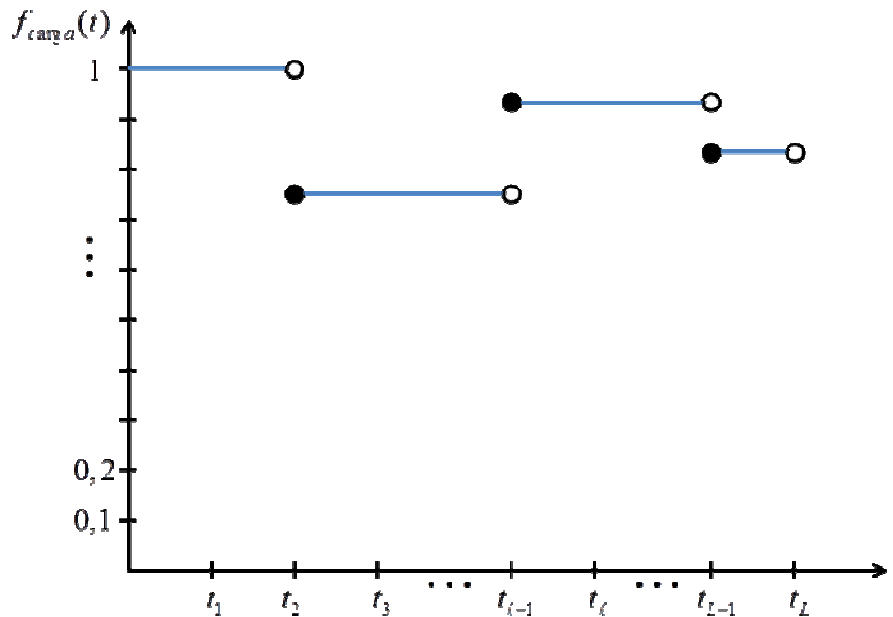


Figura 4.4: Variação do fator de carga com o tempo

Sendo assim, a constante de normalização do fluxo de nêutrons à potência de operação pode ser definida como:



$$P_{operação}(t) = \int_V \sum_{g=1}^2 \omega_g \Sigma_{fg}(\vec{r}, t) C_N(t) \phi_g(\vec{r}, t) dV = f_{carga}(t) P_{nominal} \quad (4.171)$$

onde  $C_{N,t}$  é a constante de normalização do fluxo,  $\omega_g$  é o número médio de nêutrons gerados no grupo  $g$ , e  $V$  é o volume total do núcleo. Podemos reescrever a equação (4.171) da seguinte forma:

$$C_N(t) \sum_{g=1}^2 \sum_{EC} \sum_{n \in EC} \int_{V_n} \omega_g \Sigma_{fg}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) dV = f_{carga}(t) P_{nominal} \quad (4.172)$$

onde  $\sum_{EC} \sum_{n \in EC}$  representa o somatório sobre todos os nodos  $n$  contidos em todos os elementos combustíveis  $EC$ . Definindo a densidade de potência média no volume do nodo  $n$  como,

$$\bar{P}^n(t) \equiv \sum_{g=1}^2 \omega_g \Sigma_{fg}^n(t) \bar{\phi}_g^n(t) V_n = \sum_{g=1}^2 \int_{V_n} \omega_g \Sigma_{fg}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) dV \quad (4.173)$$

e considerando que para o intervalo de queima  $[t_{\ell-1}, t_\ell]$  o fator de carga é  $f_{carga}(t_{\ell-1})$ , então a constante de normalização do fluxo, para este intervalo, usando a equação (4.172) será:

$$C_{N,\ell} = \frac{f_{carga}(t_{\ell-1}) P_{nominal}}{\sum_{EC} \sum_{n \in EC} \bar{P}^n(t) V_n} \quad (4.174)$$

onde  $N$  é o número total de nodos e  $V_n$  é o volume do nodo  $n$ . No cálculo preditor, a densidade de potência média no volume do nodo  $n$  será dada por:

$$\bar{P}^n(t_{\ell-1}) \equiv \sum_{g=1}^2 \omega_g \Sigma_{fg}^n(t_{\ell-1}) \bar{\phi}_g^n(t_{\ell-1}) \quad (4.175)$$

Com isso, as concentrações isotópicas são calculadas no final de cada subintervalo de queima, e são chamadas de preditoras ( ${}_{k_{pred}}N_i^{n,preditor}(t_{F_{k_{pred}}})$ ) conforme pode ser visto na Figura 4.5, onde é exemplificado que o intervalo de queima seja dividido em 3 subintervalos:

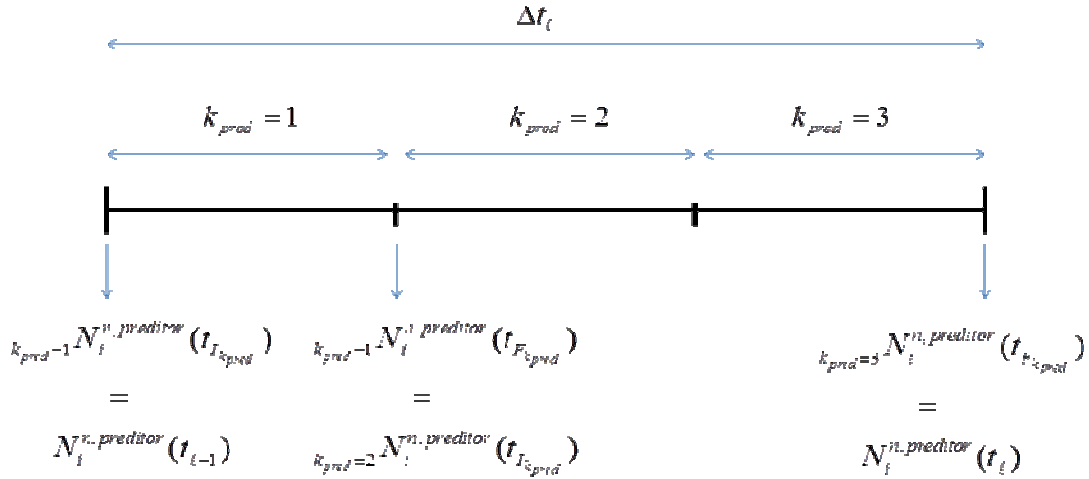


Figura 4.5: Concentrações isotópicas preditoras dos subintervalos de queima

onde  ${}_{k_{pred}}N_i^{n,preditor}(t_{I_{k_{pred}}})$  e  ${}_{k_{pred}}N_i^{n,preditor}(t_{F_{k_{pred}}})$  são as concentrações inicial e final preditoras do subintervalo  $k_{pred}$ , respectivamente. Esse procedimento de cálculo é repetido até o último subintervalo de tal forma que seja obtido a concentração final preditora do intervalo de queima  $N_i^{n,preditor}(t_\ell)$ .

Com as concentrações isotópicas calculadas no intervalo  $[t_{\ell-1}, t_\ell)$ , as seções de choque microscópicas também são obtidas para este instante ( $\sigma_{xg}^i(t_\ell)$ ), assim como as seções de choque macroscópicas  $\Sigma_{xg}^i(t_\ell)$  e o fluxo de nêutrons  $\bar{\phi}_g^n(t_\ell)$ .

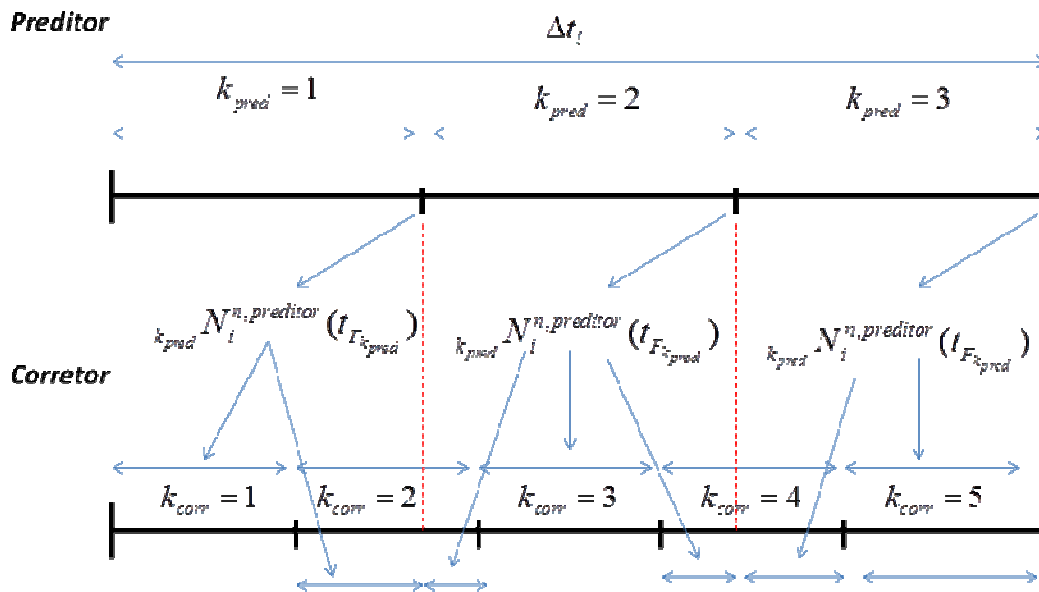
### Corretor

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 serão 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 assim calculada:

$$C_{N,\ell} = \frac{f_{carga}(t_{\ell-1})P_{nominal}}{\sum_{EC} \sum_{n \in EC} \bar{P}^n(t_\ell)V_n} \quad (4.176)$$

Agora, as concentrações isotópicas são novamente calculadas no final de cada subintervalo de queima, e são chamadas de corretoras ( ${}_{k_{corr}}N_i^{n,corretor}(t_{F_{k_{corr}}})$ ). No entanto, como vimos nas seções 4.2 e 4.3, nas equações com realimentações fizemos os desacoplamentos utilizando ora as concentrações predictoras como fontes (Seção 4.2), ora revezando o desacoplamento (Seção 4.3). No entanto, mesmo no último caso foi necessário utilizarmos as concentrações predictoras. Adicionalmente, pelo fato de permitirmos que na parte corretora ocorra um refinamento na malha com o intuito de solucionarmos o aparecimento de concentrações isotópicas negativas, houve a necessidade de dividirmos os subintervalos, criando subsubintervalos. Como forma de visualização, podemos ver na Figura 4.6 a utilização das concentrações isotópicas predictoras de cada subintervalo, supondo 3 subintervalos na parte predictora e 5 subintervalos na parte corretora, no cálculo das concentrações corretoras.



onde  ${}_{k_{corr}}N_i^{n,corretor}(t_{k_{corr}})$  e  ${}_{k_{corr}}N_i^{n,corretor}(t_{F_{corr}})$  são as concentrações inicial e final corretoras do subintervalo  $k_{corr}$ , respectivamente. Esse procedimento de cálculo é repetido até o último subintervalo de tal forma que seja obtido a concentração final corretora do intervalo de queima  $N_i^{n,corretor}(t_\ell)$ .

Com as concentrações preditoras e corretoras calculadas, as concentrações finais serão aproximadas pela seguinte média aritmética:

$$N_i^n(t) = \frac{1}{2} \left( N_i^{n,corretor}(t_\ell) + N_i^{n,preditor}(t_\ell) \right) \quad (4.177)$$

No próximo capítulo, apresentaremos os resultados obtidos com a metodologia proposta nas seções 4.3.1 e 4.3.2 adotando esse procedimento preditor-corretor.

## 5 Resultados e discussões

Para avaliar a metodologia proposta nesta Tese, aplicamos o modelo desenvolvido no Capítulo 4 a um reator típico PWR (“Pressurized Water Reactor”) para o cálculo das concentrações isotópicas dos nuclídeos presentes no núcleo. O modelo escolhido foi o núcleo de um reator com 121 elementos combustíveis (Angra 1), padrão “Westinghouse”. Esse reator foi projetado para produzir cerca de 1876 MWt (Megawatts térmicos) quando operando a plena potência. A eficiência da planta pode chegar a aproximadamente 35%, o que permite que a usina libere até 657 MWe (Megawatts elétricos) na rede.

O módulo de cálculo de depleção proposto utilizará como referência o 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 utiliza o método da matriz exponencial, descrito na seção 3.2.5. Este método será nomeado aqui, como método “Exponencial” para diferenciá-lo do método proposto.

Nas Figuras 5.1 a 5.34 apresentamos, graficamente, a evolução temporal das concentrações isotópicas de todos os nuclídeos presentes na cadeia mostrada na Figura 4.1, assim como os erros relativos em relação ao método “Exponencial” dos dois métodos apresentados nesta tese. Além disso, analisaremos um ciclo de queima completo do núcleo, composto por 28 intervalos de queima (29 instantes de queima) divididos em períodos de dias, conforme a Tabela 5.1. Na legenda dos gráficos, intitularemos como “Exponencial” o método atual utilizado no código de simulação neutrônico desenvolvido pelo PEN/COPPE/UFRJ, “Realimentações como fontes” o método apresentado na seção 4.3.1, e como “Realimentações desacopladas” o método descrito na seção 4.3.2.

Tabela 5.1: Duração (em dias) dos intervalos de queima

Intervalo de queima	Duração (dias)	Intervalo de queima	Duração (dias)	Intervalo de queima	Duração (dias)	Intervalo de queima	Duração (dias)
1	3	8	20	15	20	22	5
2	3	9	20	16	20	23	5
3	14	10	20	17	20	24	3
4	20	11	20	18	20	25	6
5	20	12	20	19	20	26	5
6	20	13	20	20	5	27	5
7	20	14	20	21	5	28	3

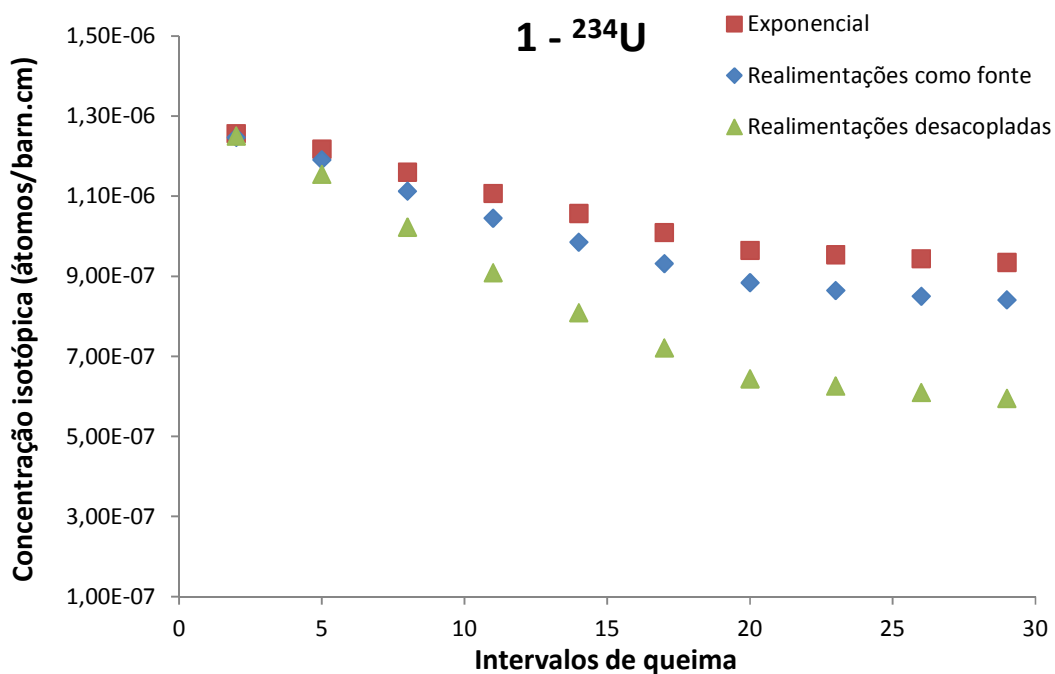


Figura 5.1: Concentração isotópica do <sup>234</sup>U variando com o tempo

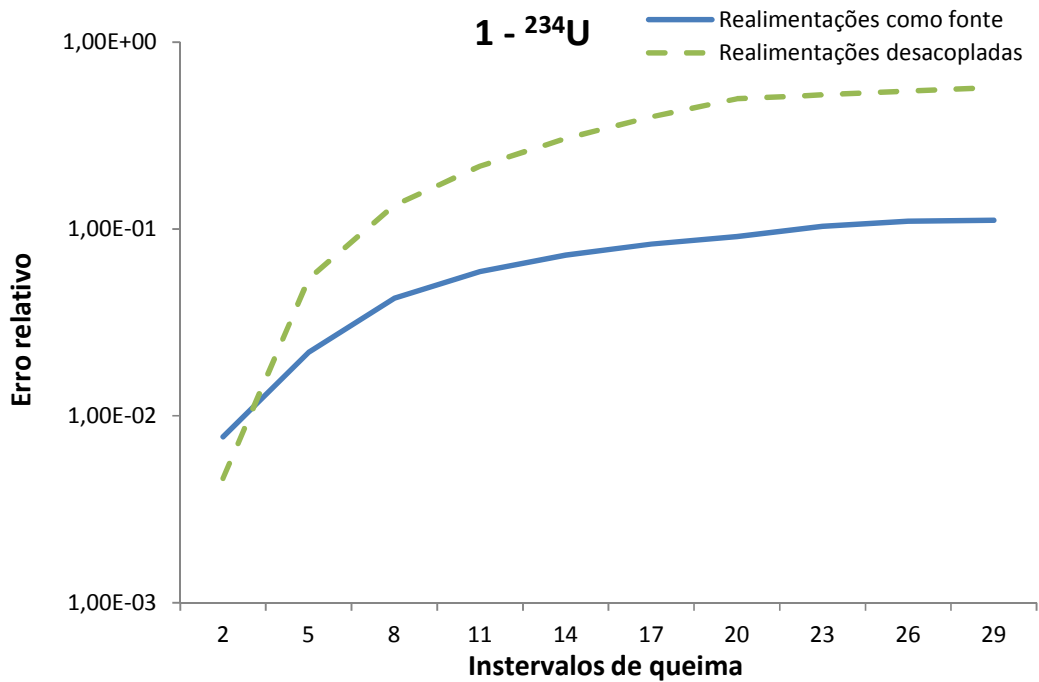


Figura 5.2: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{234}\text{U}$  variando com o tempo

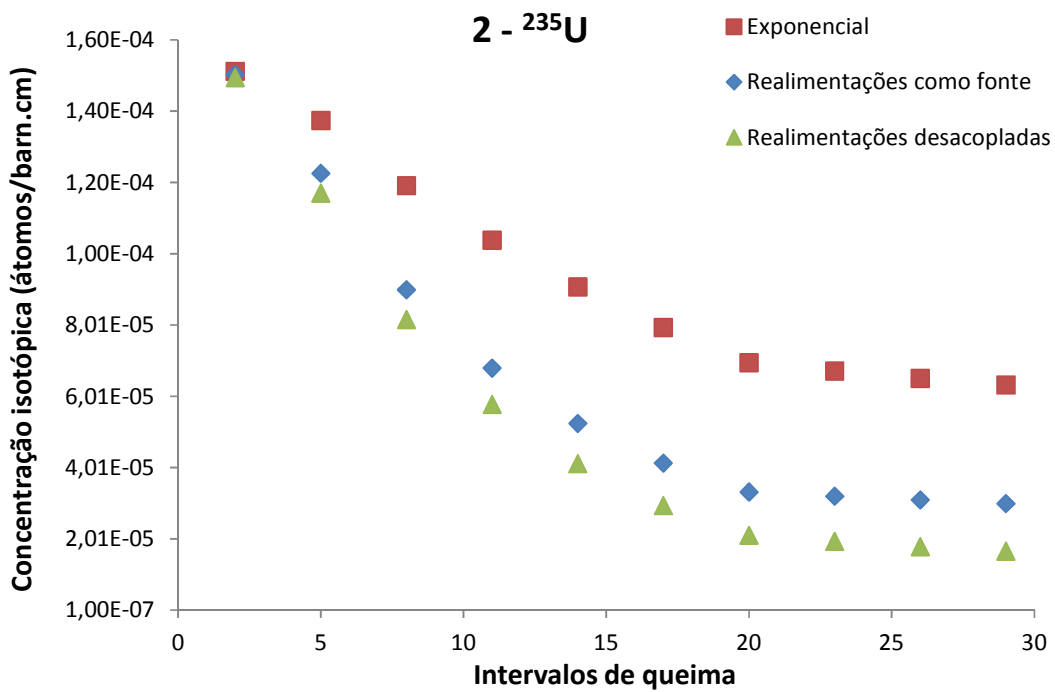


Figura 5.3: Concentração isotópica do  $^{235}\text{U}$  variando com o tempo

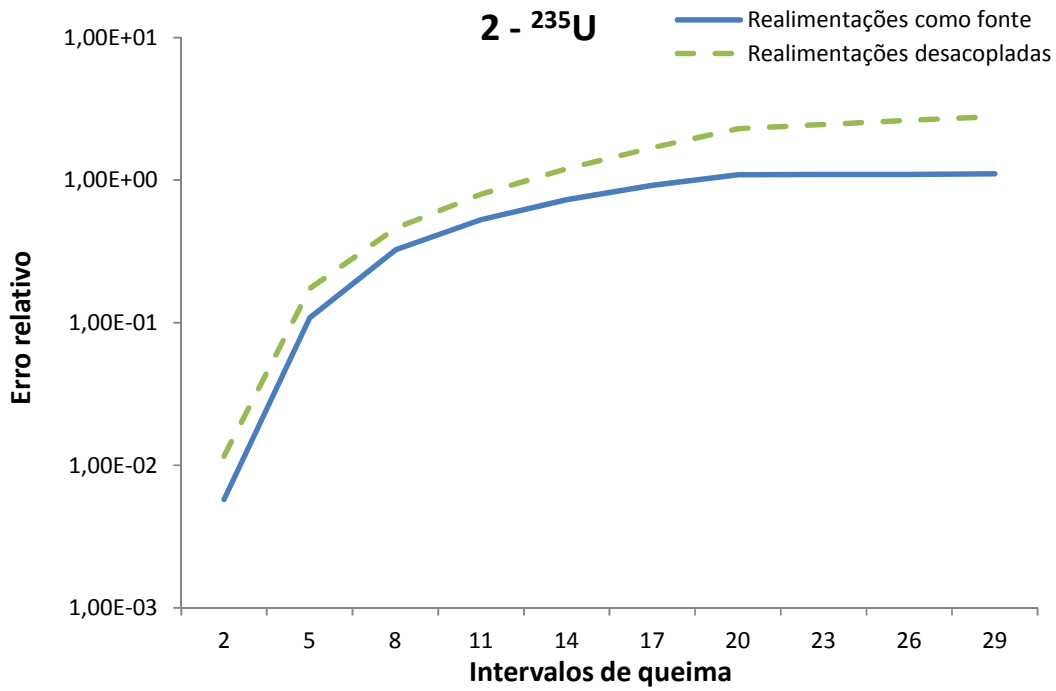


Figura 5.4: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{235}\text{U}$  variando com o tempo

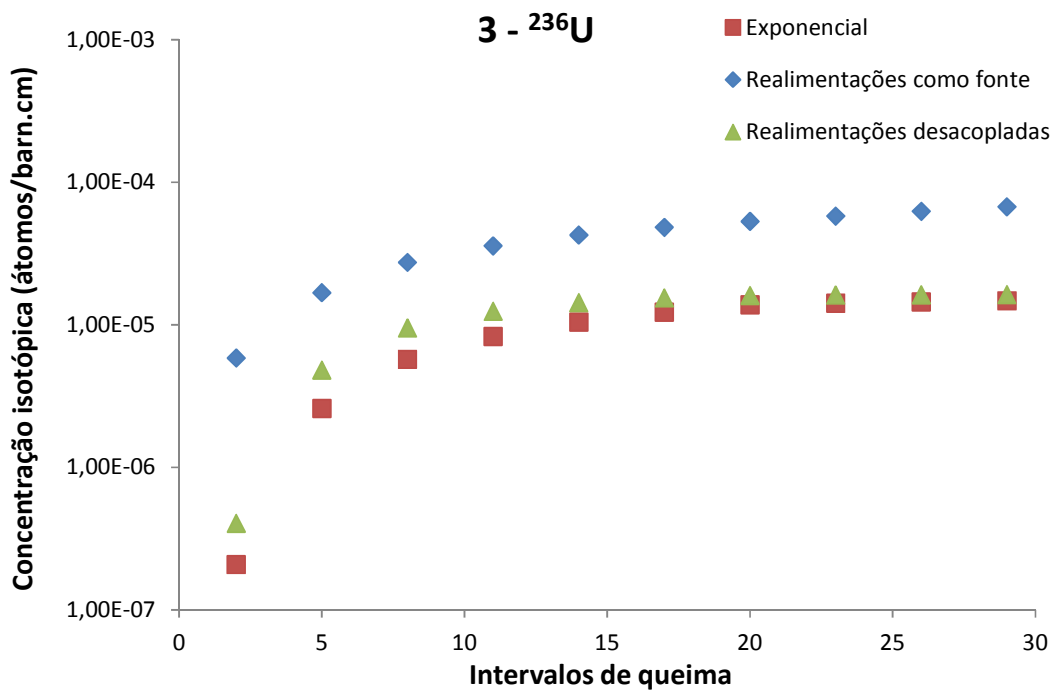


Figura 5.5: Concentração isotópica do  $^{236}\text{U}$  variando com o tempo.



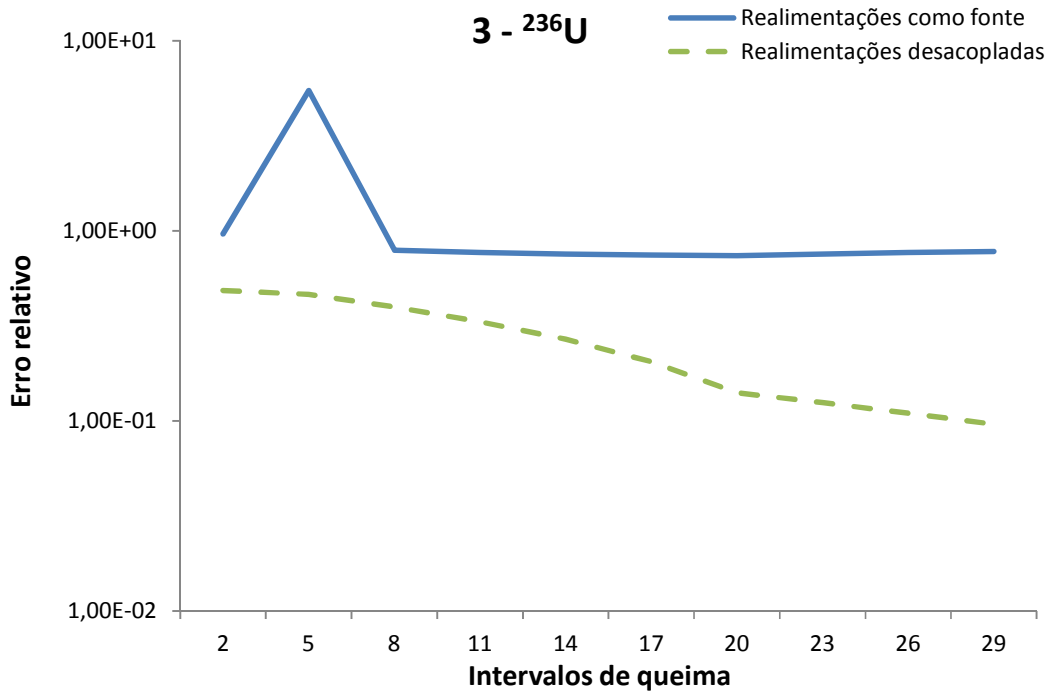


Figura 5.6: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{236}\text{U}$  variando com o tempo.

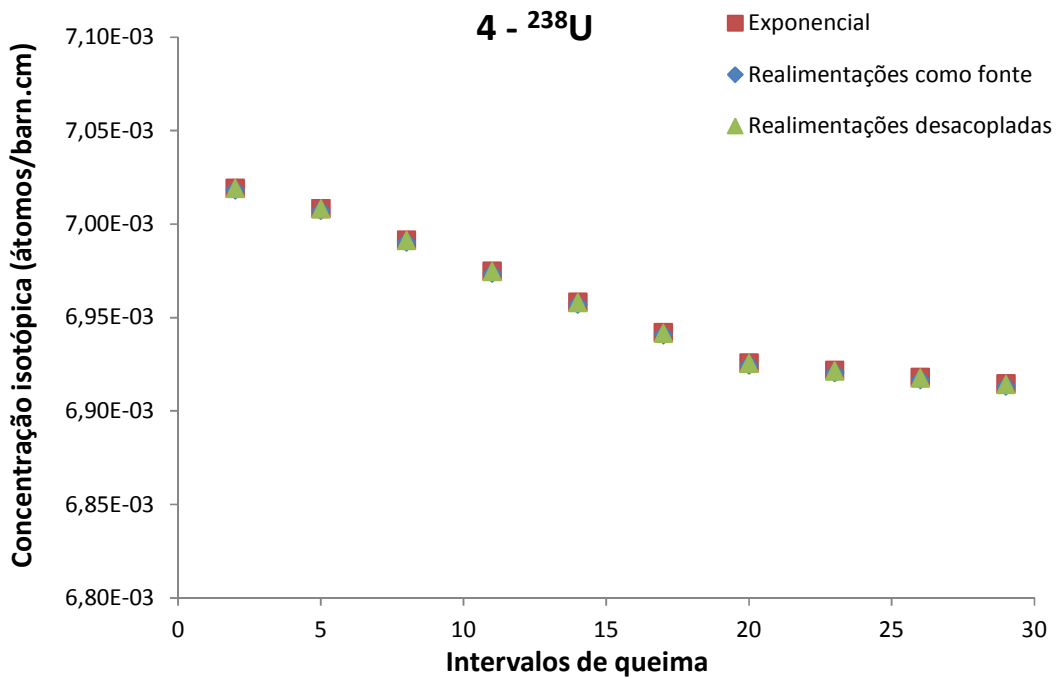


Figura 5.7: Concentração isotópica do  $^{238}\text{U}$  variando com o tempo

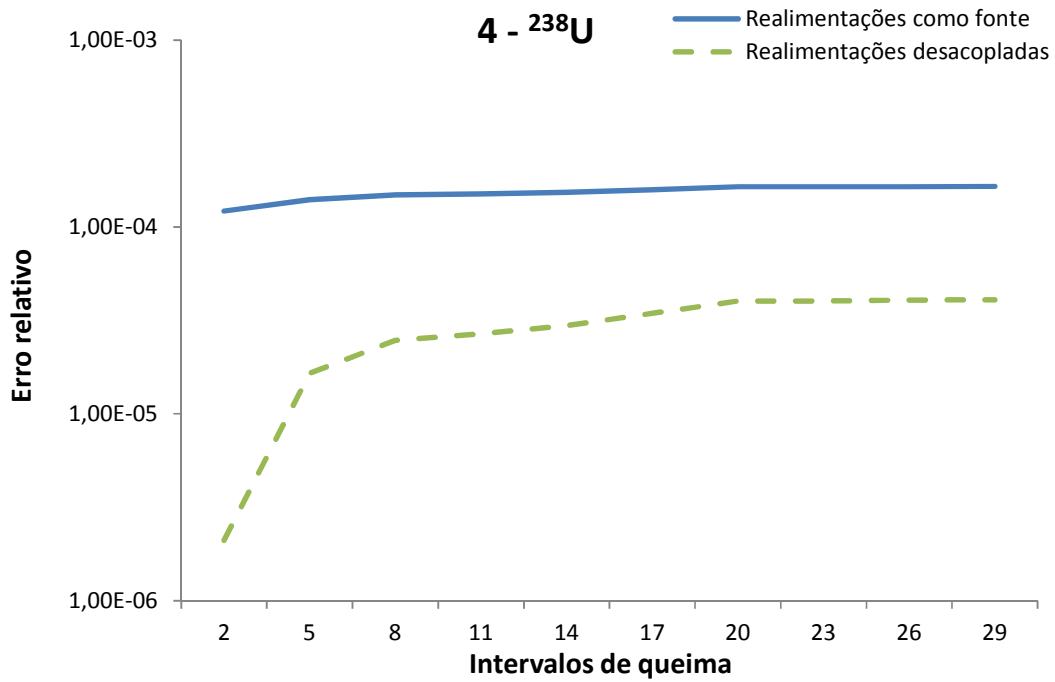


Figura 5.8: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{238}\text{U}$  variando com o tempo.

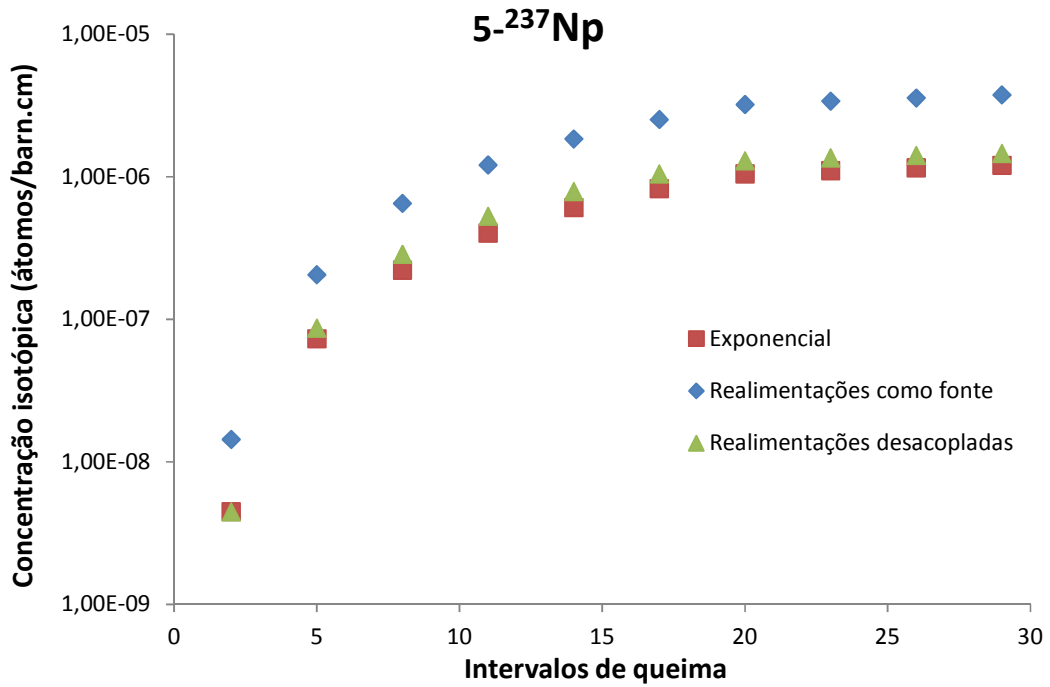


Figura 5.9: Concentração isotópica do  $^{237}\text{Np}$  variando com o tempo

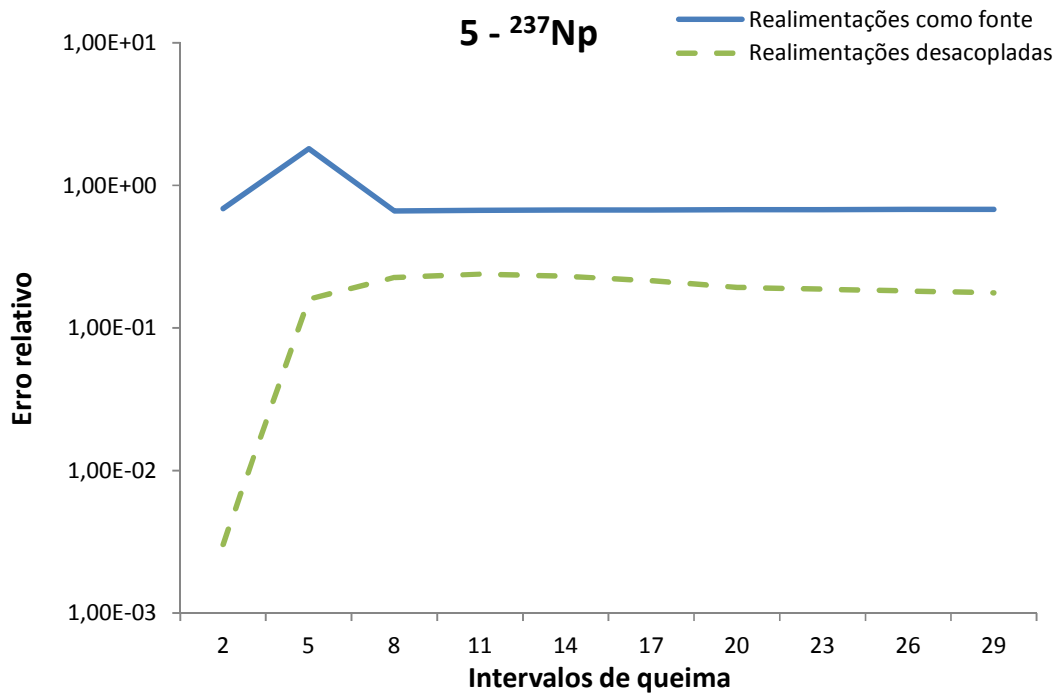


Figura 5.10: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{237}\text{Np}$  variando com o tempo.

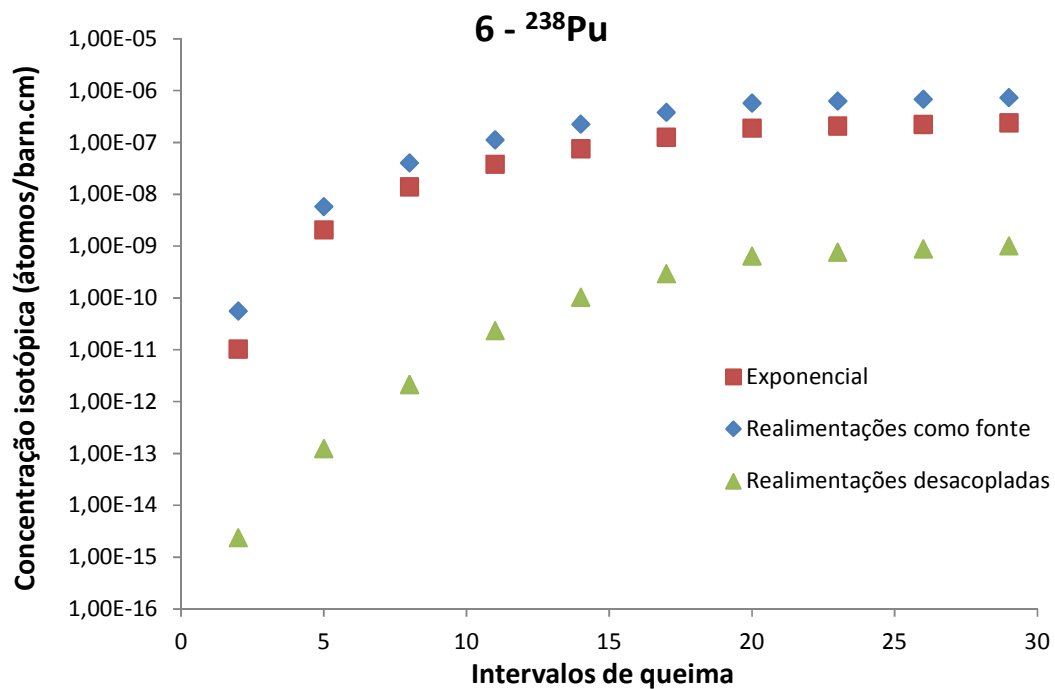


Figura 5.11: Concentração isotópica do  $^{238}\text{Pu}$  variando com o tempo

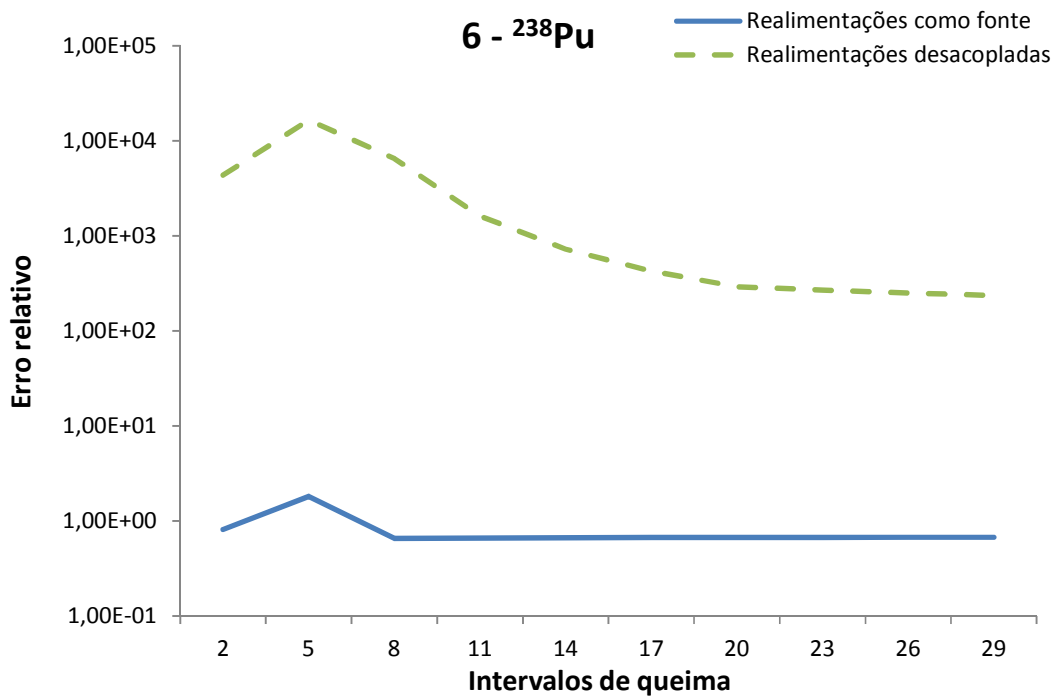


Figura 5.12: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{238}\text{Pu}$  variando com o tempo.

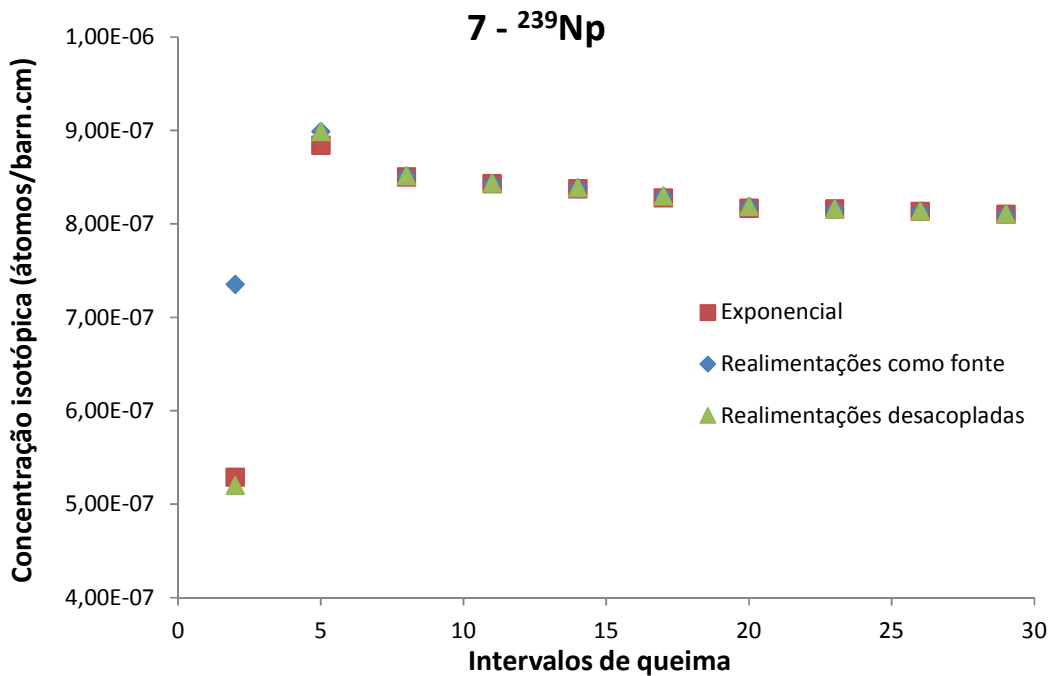


Figura 5.13: Concentração isotópica do  $^{239}\text{Np}$  variando com o tempo

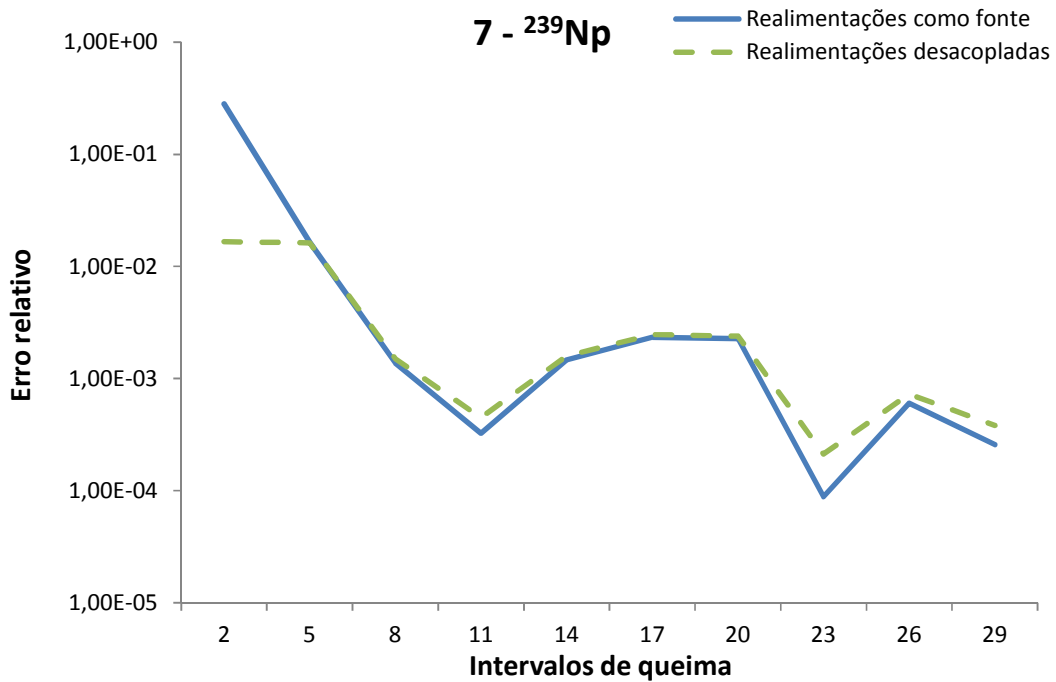


Figura 5.14: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{239}\text{Np}$  variando com o tempo.

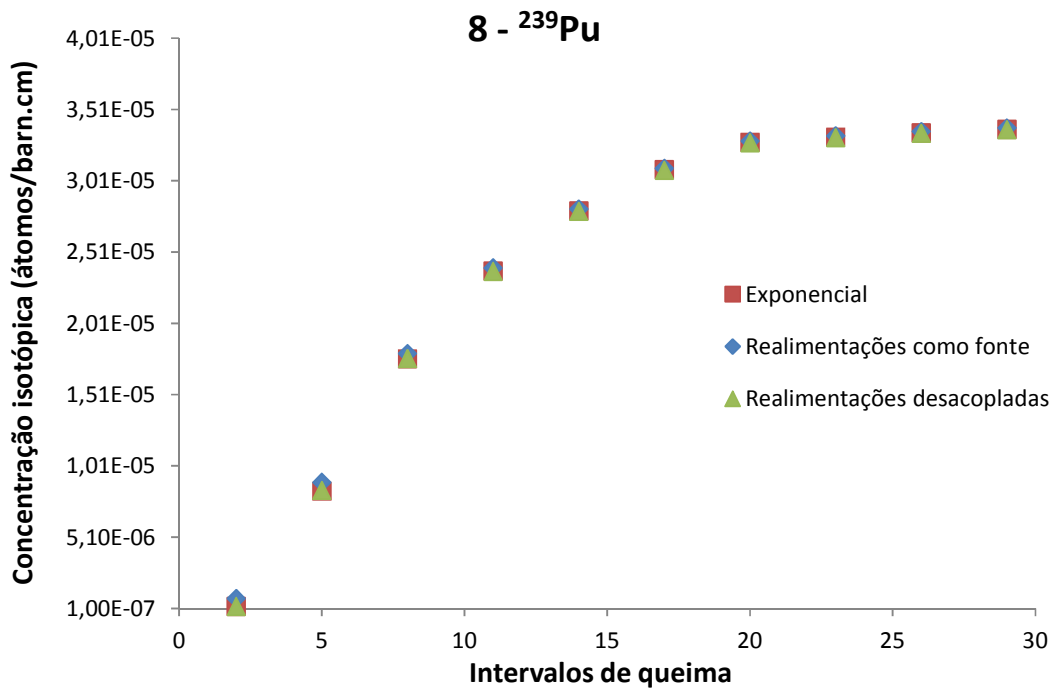


Figura 5.15: Concentração isotópica do  $^{239}\text{Pu}$  variando com o tempo

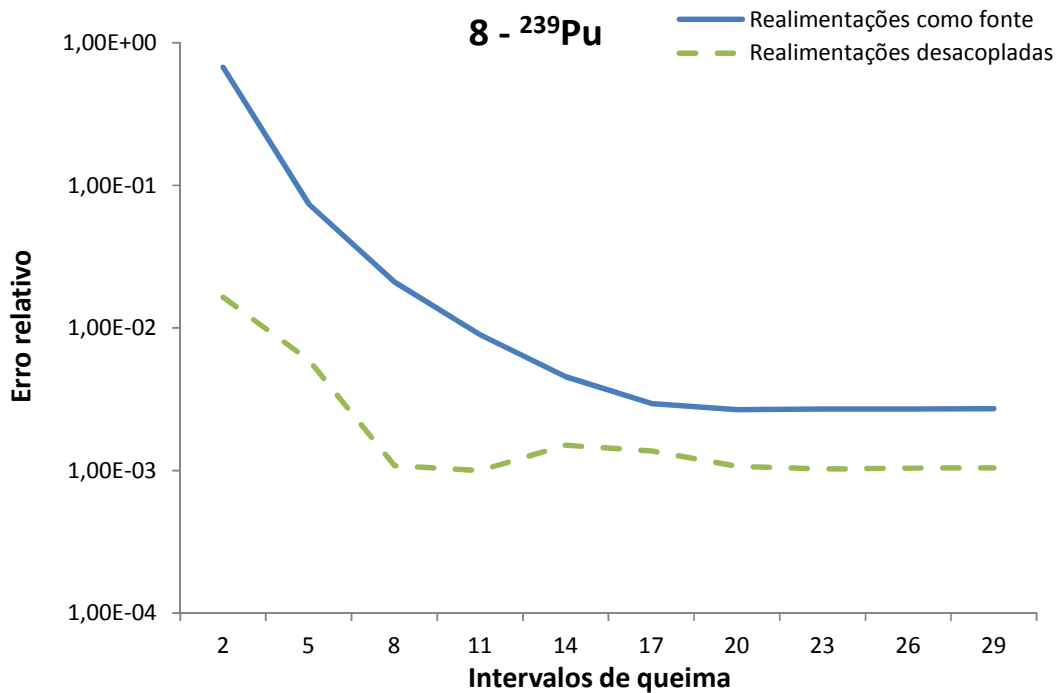


Figura 5.16: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{239}\text{Pu}$  variando com o tempo.

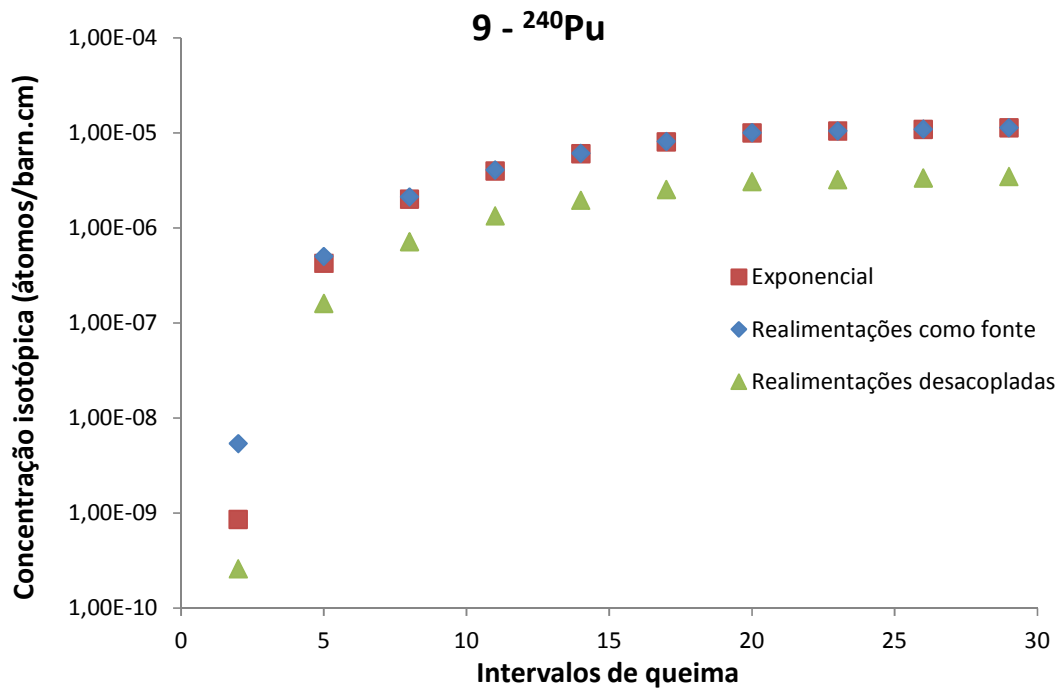


Figura 5.17: Concentração isotópica do  $^{240}\text{Pu}$  variando com o tempo

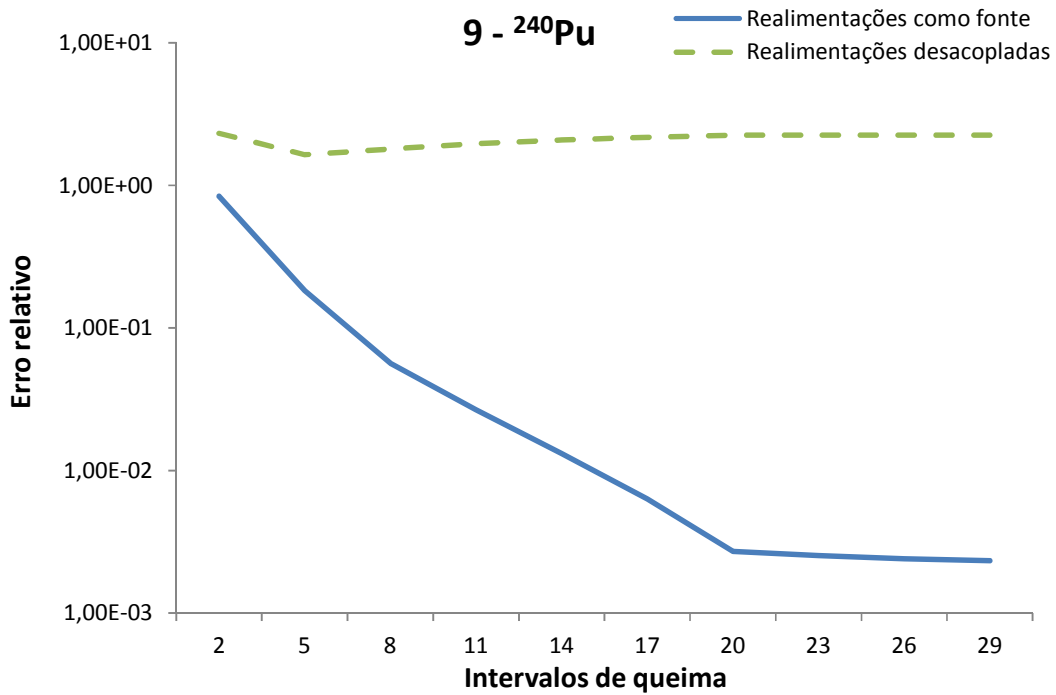


Figura 5.18: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{240}\text{Pu}$  variando com o tempo.

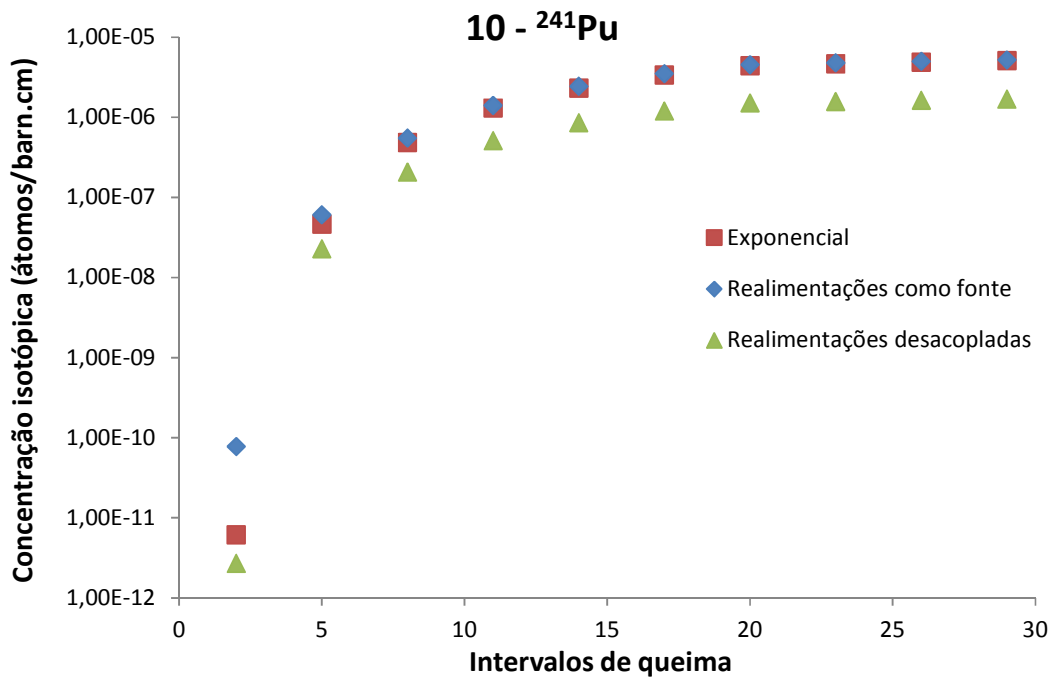


Figura 5.19: Concentração isotópica do  $^{241}\text{Pu}$  variando com o tempo

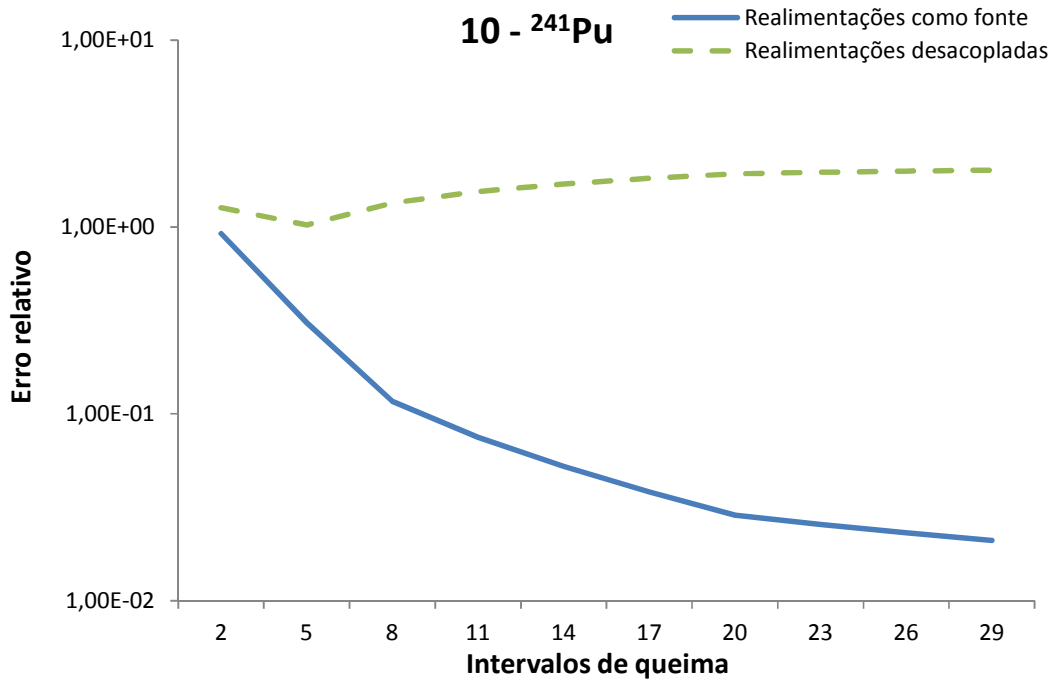


Figura 5.20: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{241}\text{Pu}$  variando com o tempo.

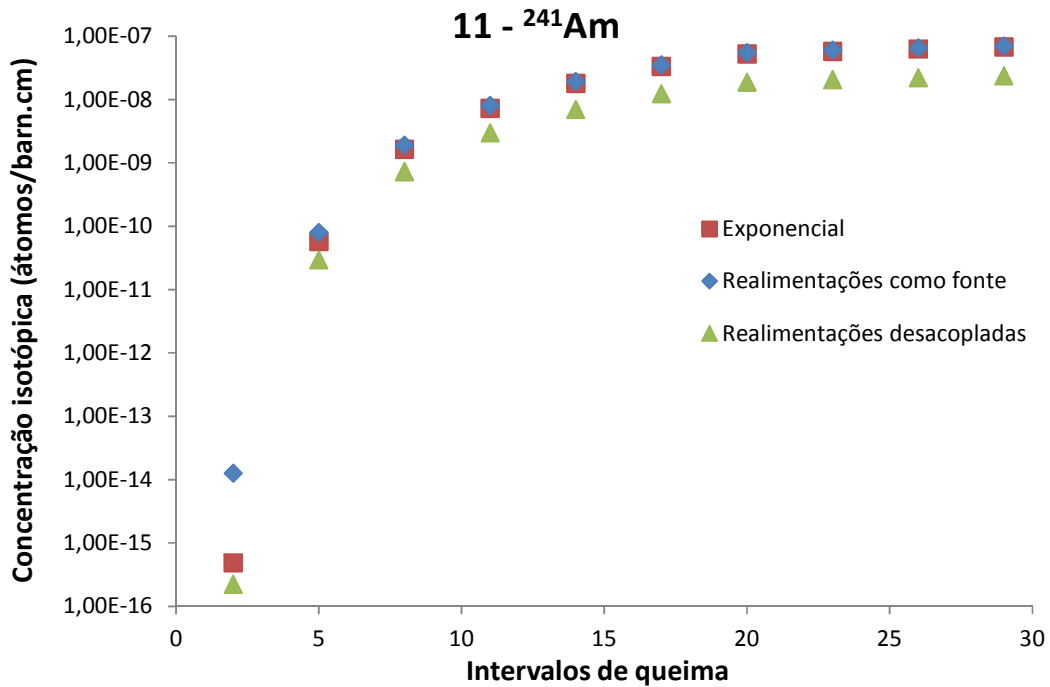


Figura 5.21: Concentração isotópica do  $^{241}\text{Am}$  variando com o tempo



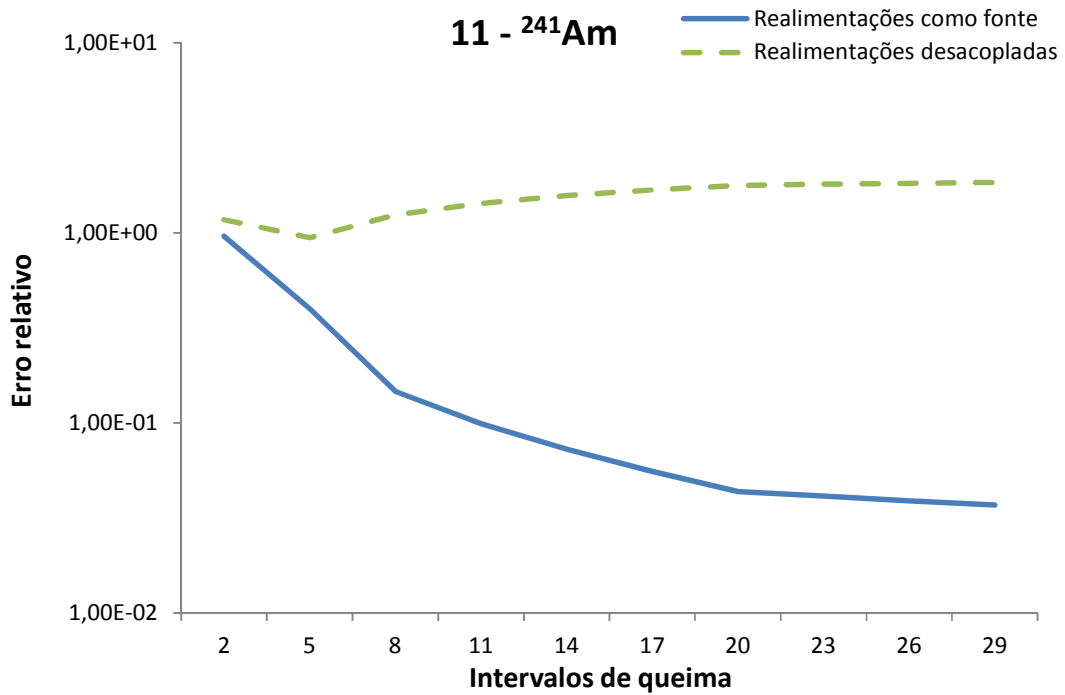


Figura 5.22: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{241}\text{Am}$  variando com o tempo.

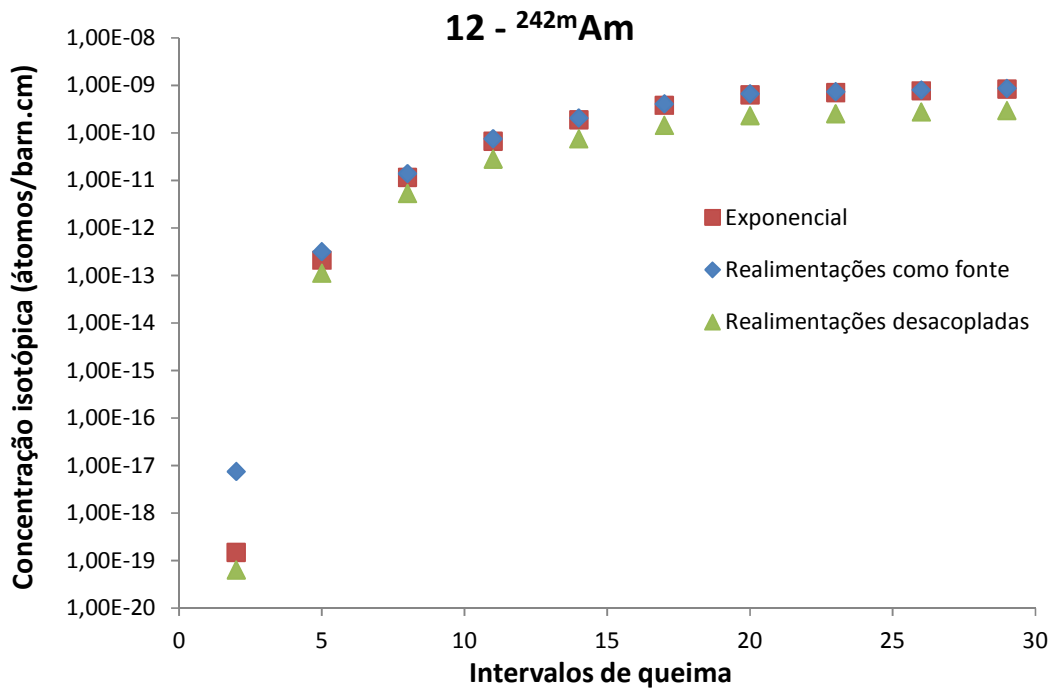


Figura 5.23: Concentração isotópica do  $^{242m}\text{Am}$  variando com o tempo

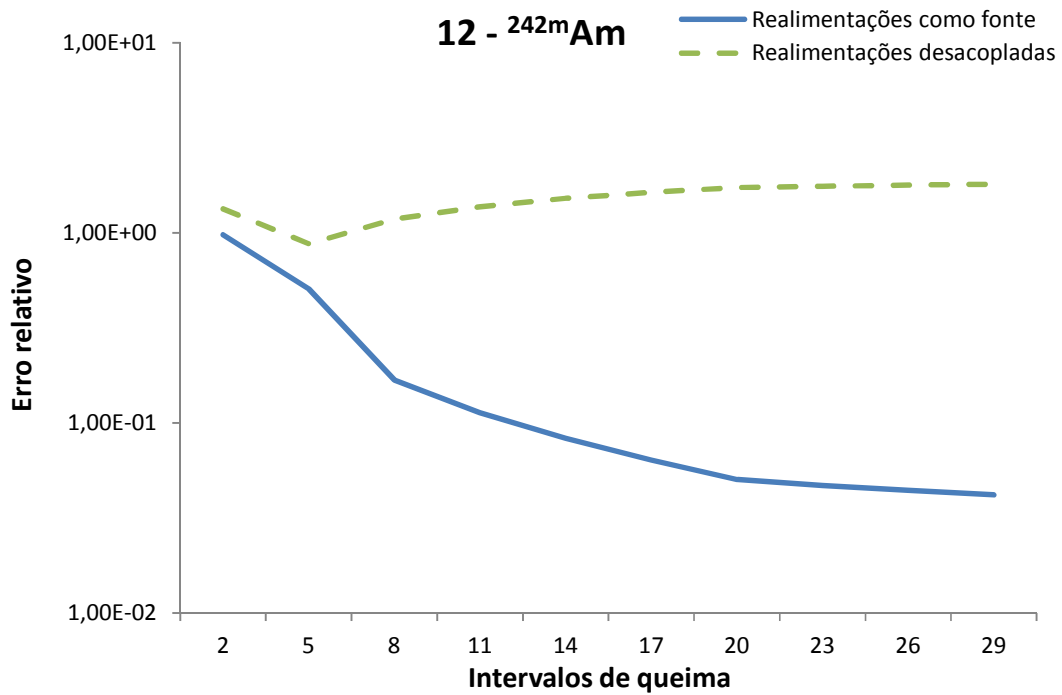


Figura 5.24: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{242m}\text{Am}$  variando com o tempo.

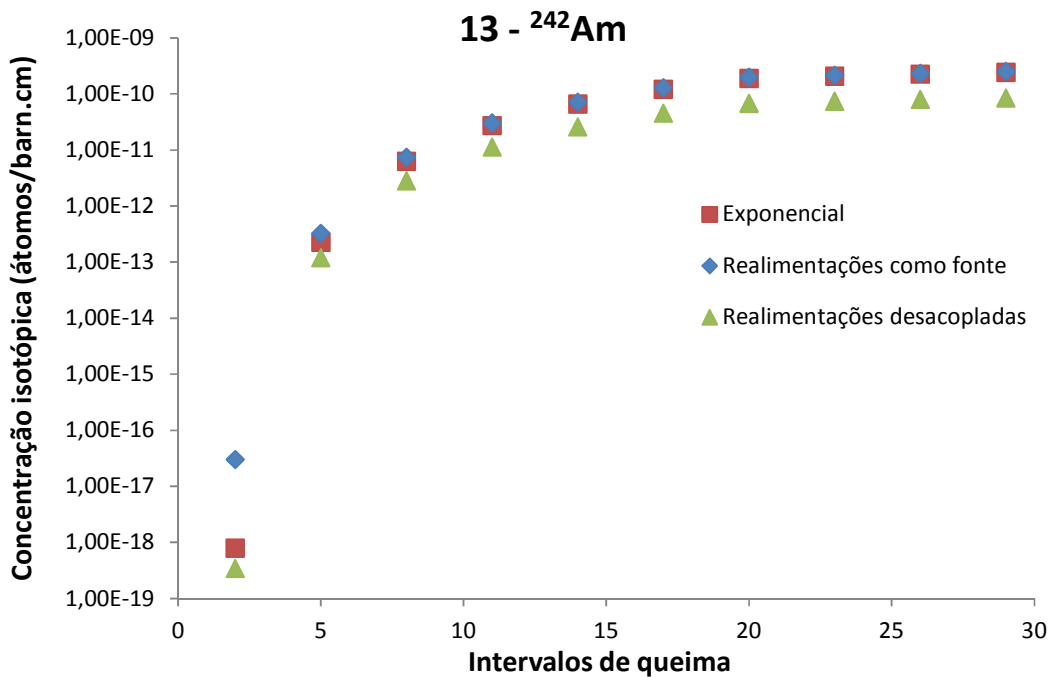


Figura 5.25: Concentração isotópica do  $^{242}\text{Am}$  variando com o tempo

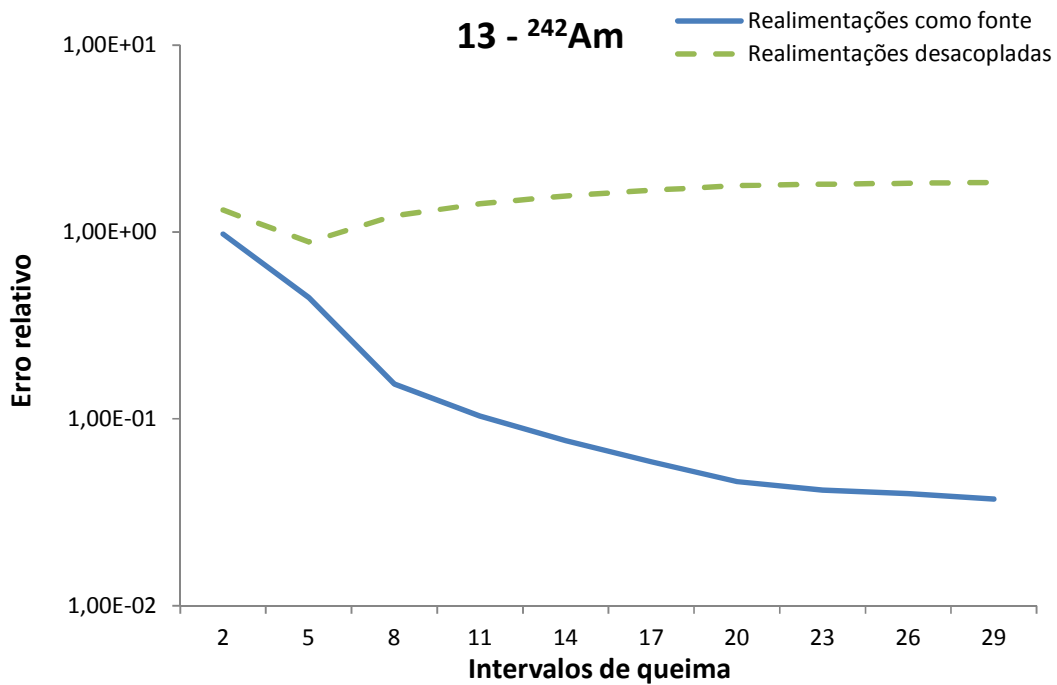


Figura 5.26: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{242}\text{Am}$  variando com o tempo.

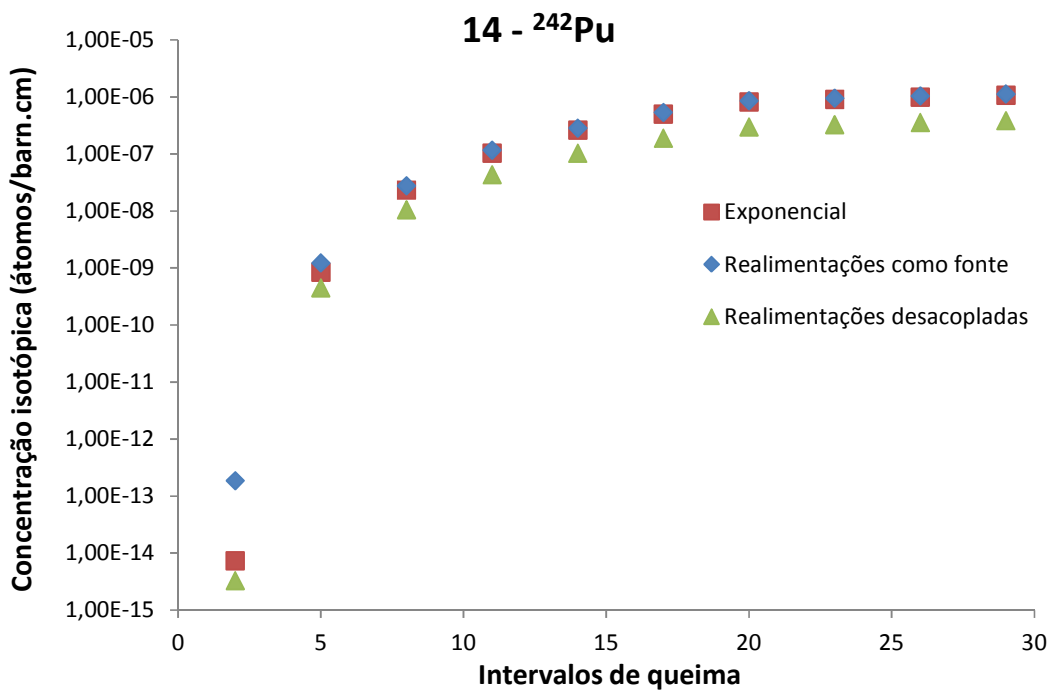


Figura 5.27: Concentração isotópica do  $^{242}\text{Pu}$  variando com o tempo

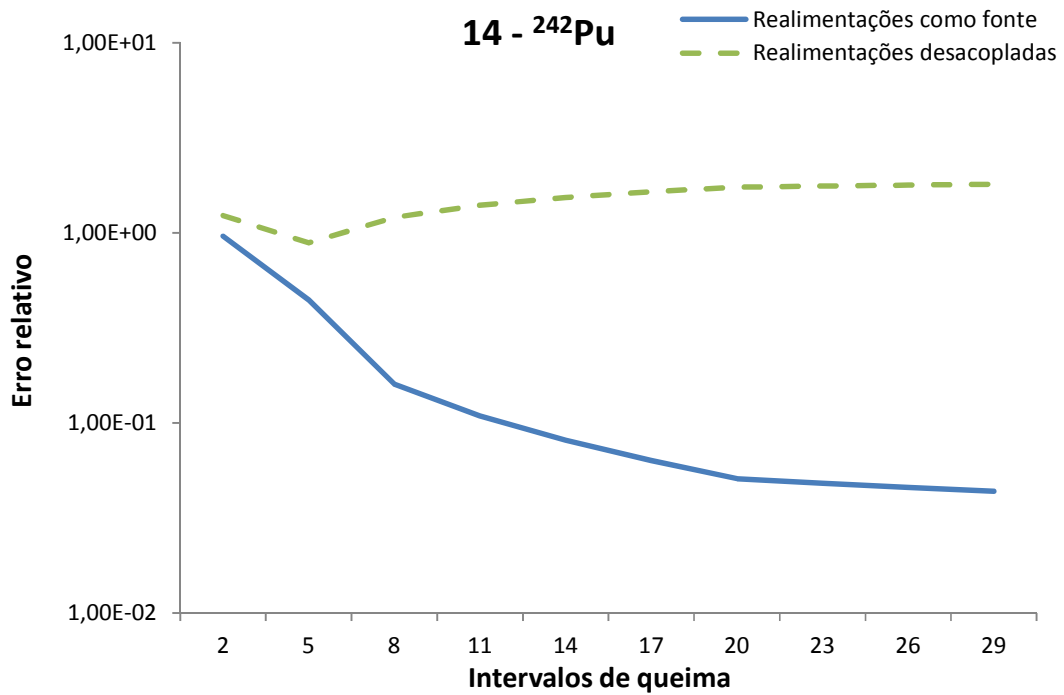


Figura 5.28: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{242}\text{Pu}$  variando com o tempo.

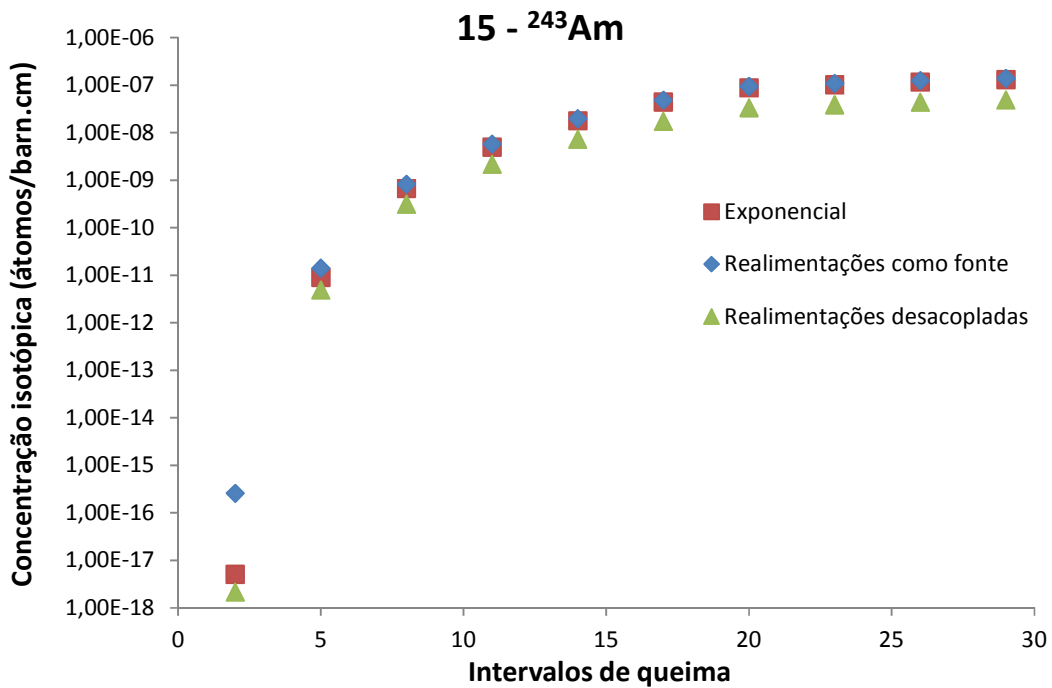


Figura 5.29: Concentração isotópica do  $^{243}\text{Am}$  variando com o tempo

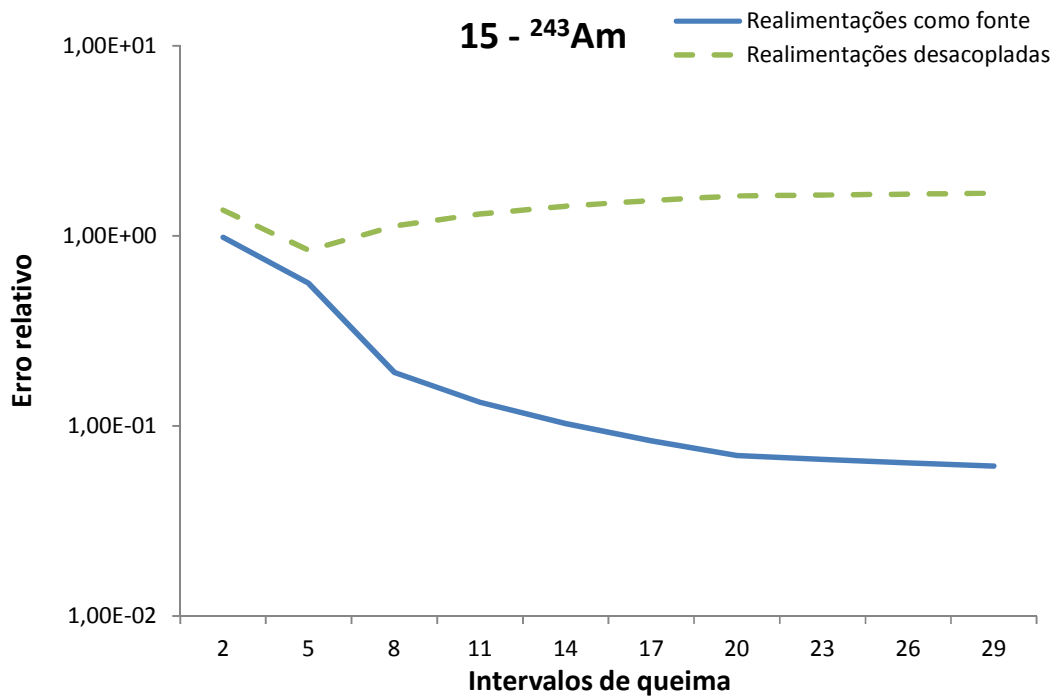


Figura 5.30: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{243}\text{Am}$  variando com o tempo.

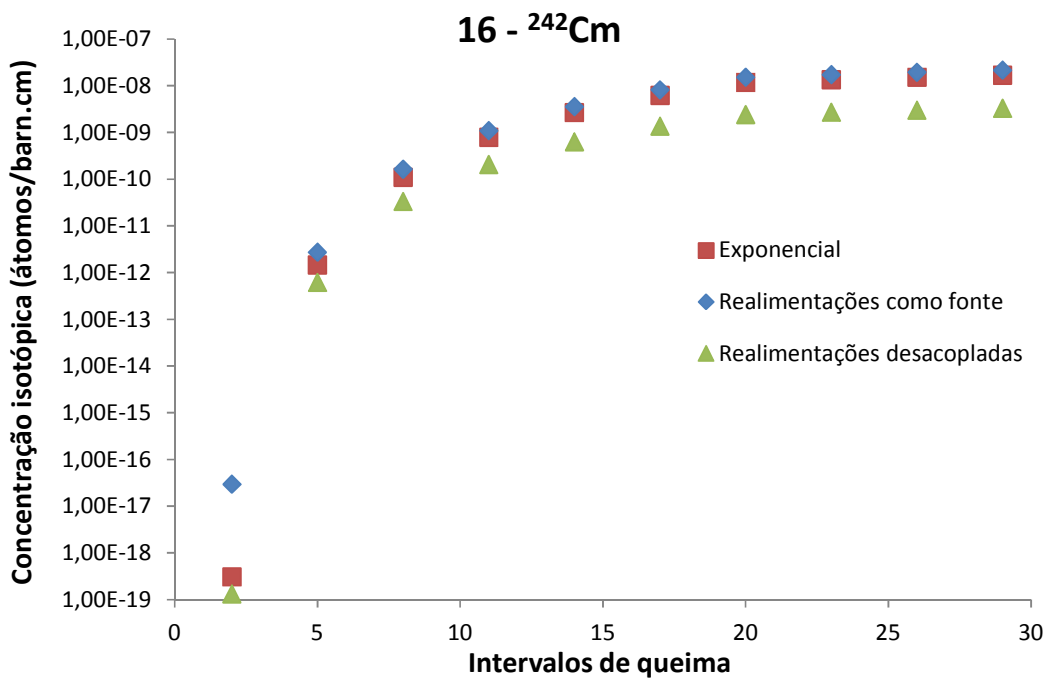


Figura 5.31: Concentração isotópica do  $^{242}\text{Cm}$  variando com o tempo.

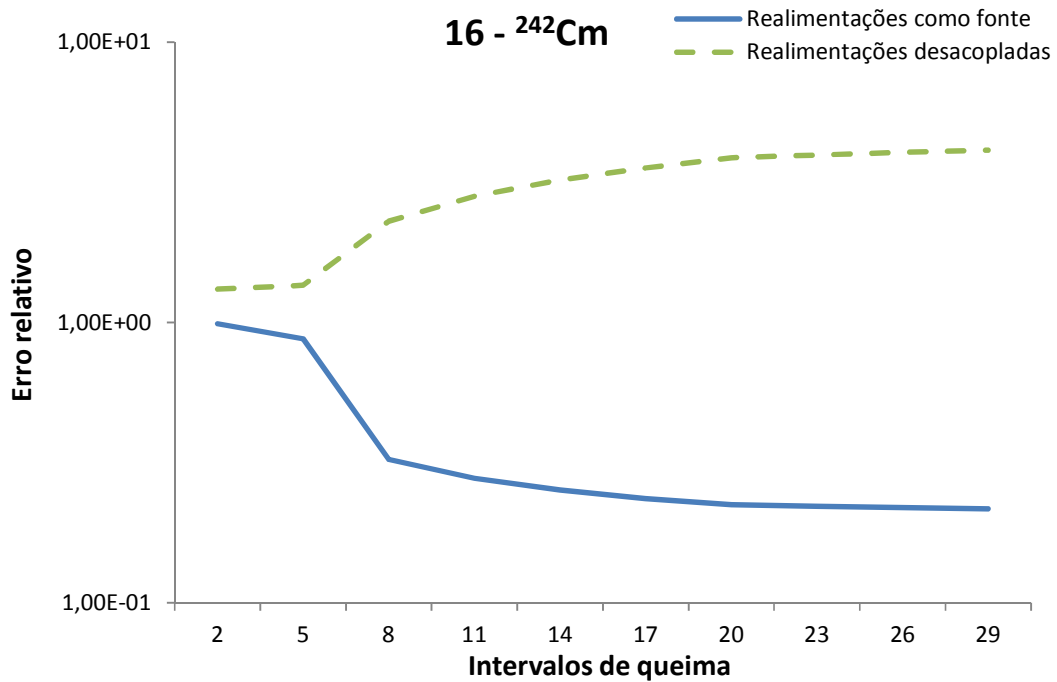


Figura 5.32: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{242}\text{Cm}$  variando com o tempo.

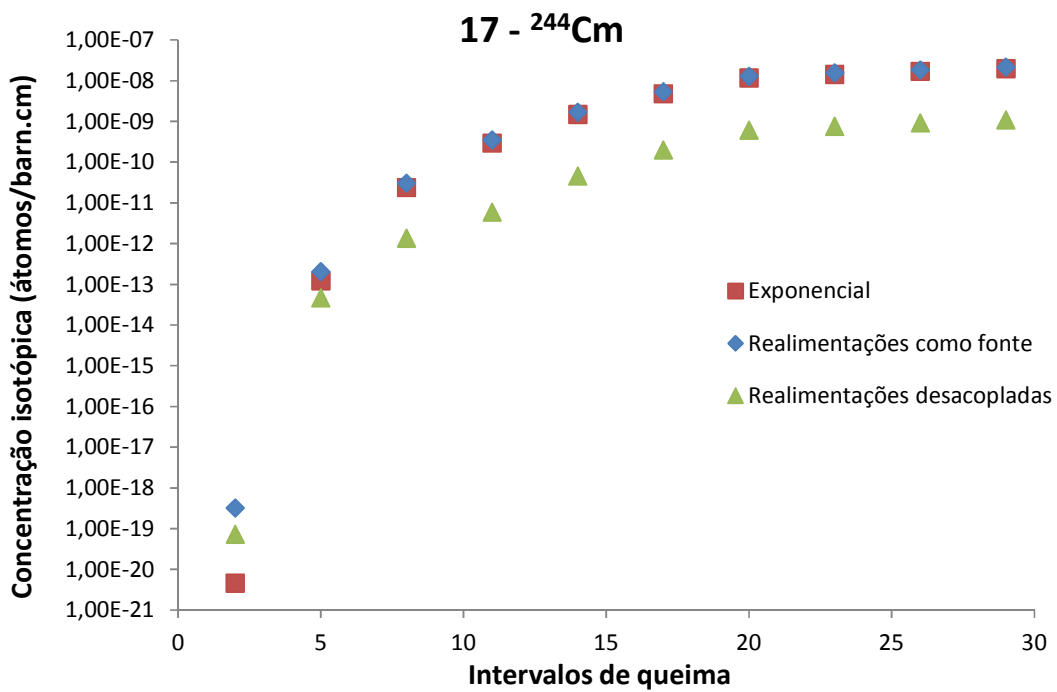


Figura 5.33: Concentração isotópica do  $^{244}\text{Cm}$  variando com o tempo.

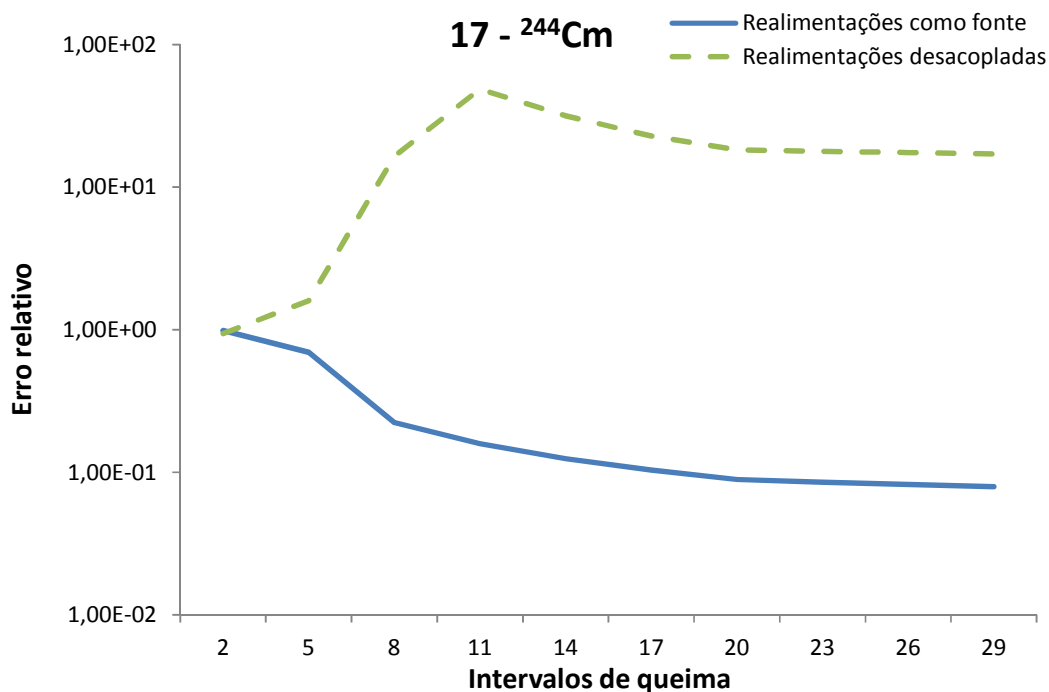


Figura 5.34: Erro relativo da concentração isotópica do  $^{244}\text{Cm}$  variando com o tempo.

Como forma de comparação entre as metodologias, apresentamos na Tabela 5.2 as concentrações isotópicas de todos os nuclídeos calculadas no último intervalo de tempo, ou seja, para o vigésimo oitavo intervalo de queima.

Tabela 5.2: Concentrações Isotópicas referentes ao 28º intervalo de queima.

Nuclídeo	Concentrações Isotópicas		
	Exponencial	Realimentações como fonte	Realimentações Desacopladas
1	9,351587085456870E-07	8,41317741585949E-07	5,95663125145064E-07
2	6,332865035813230E-05	3,01223285992409E-05	1,67118323299008E-05
3	1,472736709251920E-05	6,72943255023725E-05	1,62921006111381E-05
4	6,914517099753320E-03	6,91337846325799E-03	6,91423450993866E-03
5	1,203054620141080E-06	3,75509300867305E-06	1,46055761670267E-06
6	2,410492284492850E-07	7,35730414422168E-07	1,01709086207489E-09
7	8,104606433960700E-07	8,10669768876764E-07	8,10770149778584E-07
8	3,373728001950650E-05	3,38293577107768E-05	3,37020997908025E-05
9	1,132672635457640E-05	1,13530945372823E-05	3,48385634733365E-06
10	5,100149710207130E-06	5,20970475188856E-06	1,69153750092840E-06
11	6,769685092371010E-08	7,02932260734003E-08	2,37832908746729E-08
12	8,351149535042040E-10	8,71575635089945E-10	2,97771294970427E-10

13	2,414224068899620E-10	2,50776900707219E-10	8,48802883110512E-11
14	1,082831283682000E-06	1,13225664196449E-06	3,86253435381519E-07
15	1,317979370098580E-07	1,40431181150432E-07	4,92388085909702E-08
16	1,691482788839130E-08	2,15926625268174E-08	3,30705906770696E-09
17	1,994731210095620E-08	2,16654386037408E-08	1,10444967611576E-09

Pela análise dos gráficos e dos valores apresentados, podemos perceber que, com exceção dos nuclídeos  $^{236}\text{U}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{237}\text{Np}$  e  $^{239}\text{Pu}$ , a metodologia onde as realimentações ocorridas por decaimentos alfas são consideradas termos fontes das equações apresentaram menor erro relativo. Analisando o nuclídeo  $^{236}\text{U}$  vemos que a concentração calculada pelo método “Realimentações desacopladas” obteve uma ótima aproximação do método referência quando comparado à outra metodologia. Como já observado, esse nuclídeo não possui termo fonte para ser aproximado e quando calculado utilizando o método descrito na seção 4.3.2, requer apenas o desacoplamento sucessivo, nos subintervalos ímpares e pares, de acordo com os subintervalos necessários. Sendo assim, considerando os valores obtidos para os outros nuclídeos cujos desacoplamentos exigem a aproximação dos termos fonte para permitir a aplicação do método, parece-nos razoável afirmar que a metodologia de desacoplamento, quando isenta de termos aproximados apresenta alta exatidão. Por consequência, uma vez que o nuclídeo  $^{237}\text{Np}$  é alimentado pelo  $^{236}\text{U}$ , a alta compatibilidade de resultados propagou-se para aquele nuclídeo. Utilizando um raciocínio análogo, apesar das concentrações utilizando os dois métodos apresentarem valores muito próximos, o  $^{239}\text{Pu}$  apresentou menor erro relativo utilizando as realimentações desacopladas devido à contribuição positiva proporcionada pelo  $^{237}\text{Np}$ .

Prosseguindo a análise, agora considerando o nuclídeo  $^{238}\text{Pu}$ , de acordo com o método descrito na seção 4.3.2 a sua concentração, na parte preditora, é regida pelo sistema de equações dado por (4.143) e (4.144). Como a aproximação utilizada na implementação do código, para esse método na parte preditora, considerou uma contribuição nula dos termos fontes, a sua equação passou a depender apenas de sua própria concentração nos subintervalos pares. Em virtude dessa aproximação, a sua concentração apresentou valores consideravelmente diferentes do método de referência. Apesar dessa discrepância de dados, podemos perceber pelos valores da concentração



do oitavo nuclídeo da cadeia, o  $^{239}\text{Pu}$ , que as duas metodologias apresentaram valores muito próximos da referência, indicando que a contribuição para a concentração do  $^{239}\text{Pu}$  devida ao sexto nuclídeo possui menor relevância do que a contribuição proporcionada pelo quinto nuclídeo, uma vez que nesse nuclídeo o método “Realimentações como fonte” apresentou maior erro relativo, e essa parcela contribuiu para o maior erro relativo, utilizando a mesma metodologia, do nuclídeo  $^{239}\text{Pu}$ .

A partir do nono nuclídeo, o  $^{240}\text{Pu}$ , até o décimo sétimo nuclídeo, o  $^{244}\text{Cm}$ , percebemos um perfil semelhante tanto na curva de concentração quanto na curva de erro relativo. Particularmente, na curva de erro, observamos uma mudança brusca na inclinação a partir do terceiro intervalo de tempo onde há um aumento significativo do tempo associado ao respectivo intervalo de queima. A partir desse instante observamos comportamentos opostos das duas metodologias, onde uma apresenta leve aumento do erro relativo enquanto a outra segue uma redução mais proeminente do erro. Possivelmente, na metodologia “Realimentações desacopladas” onde foram desacoplados mais nuclídeos, os termos fontes presentes no conjunto de equações necessários à aplicação do método influenciaram o leve aumento do erro relativo. Como influência adicional observada a esse padrão, temos o perfil do erro relativo do nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$ , que apresenta um aumento significativo no erro, provavelmente influenciado pela aproximação realizada no  $^{243}\text{Am}$ , como pode ser visto pelas equações (4.146) e (4.151).

Com o intuito de proporcionamos uma visão geral das metodologias, apresentamos simultaneamente nas Figuras 5.35 a 5.38 os erros relativos dos 17 nuclídeos presentes na cadeia para alguns intervalos de queima.

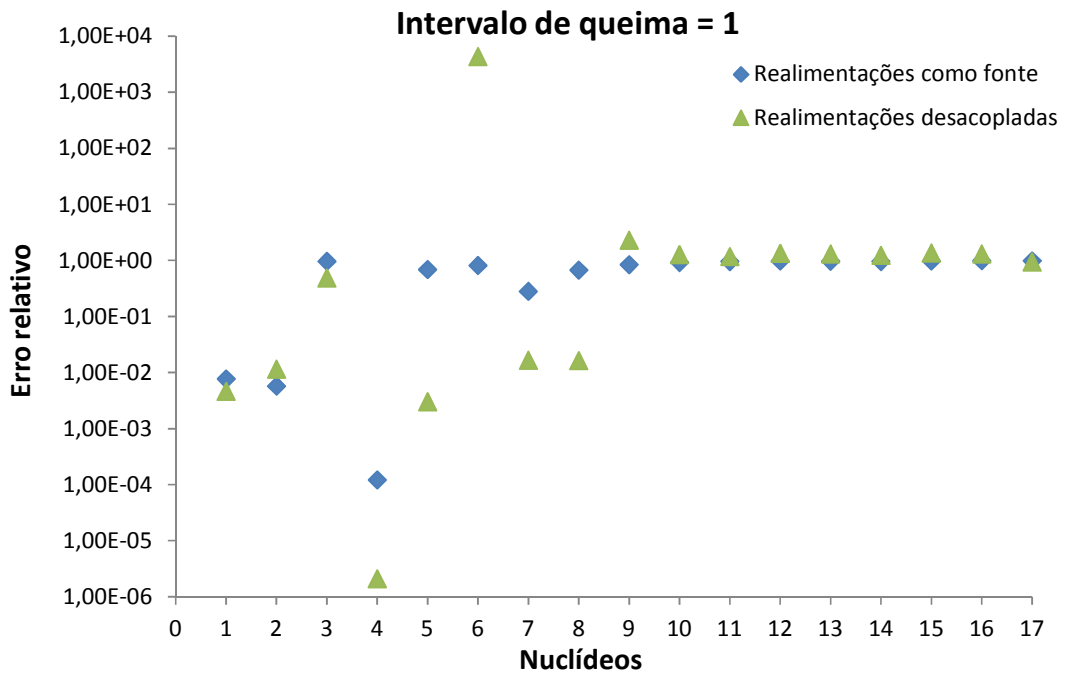


Figura 5.35: Erro relativo das concentrações isotópicas de todos os nuclídeos da cadeia no 1º intervalo de queima.

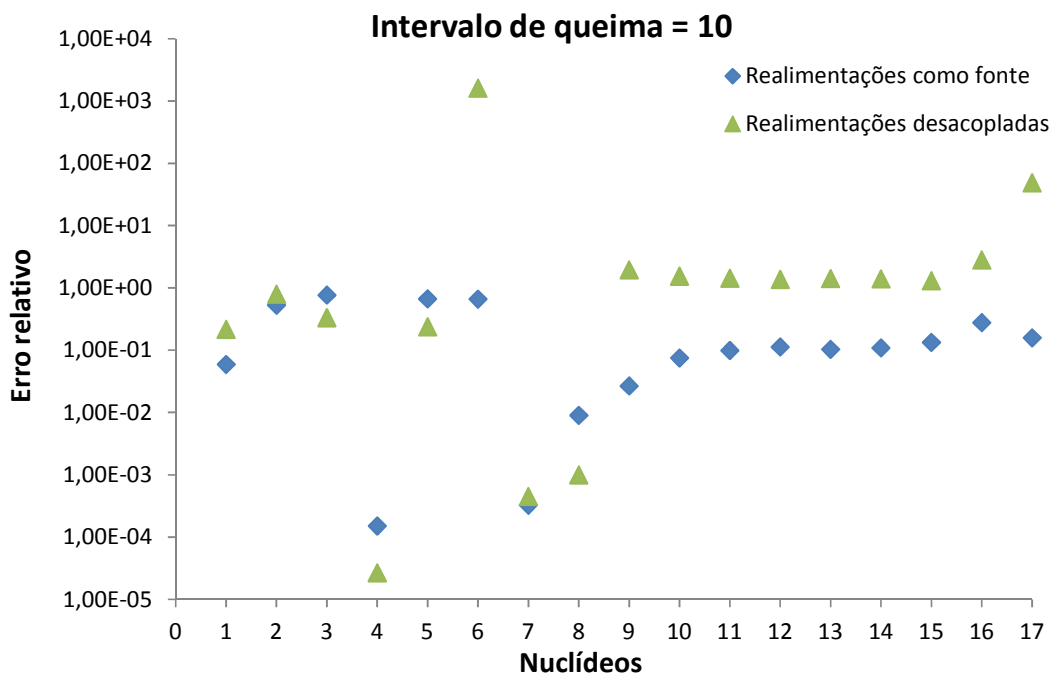


Figura 5.36: Erro relativo das concentrações isotópicas de todos os nuclídeos da cadeia no 10º intervalo de queima.

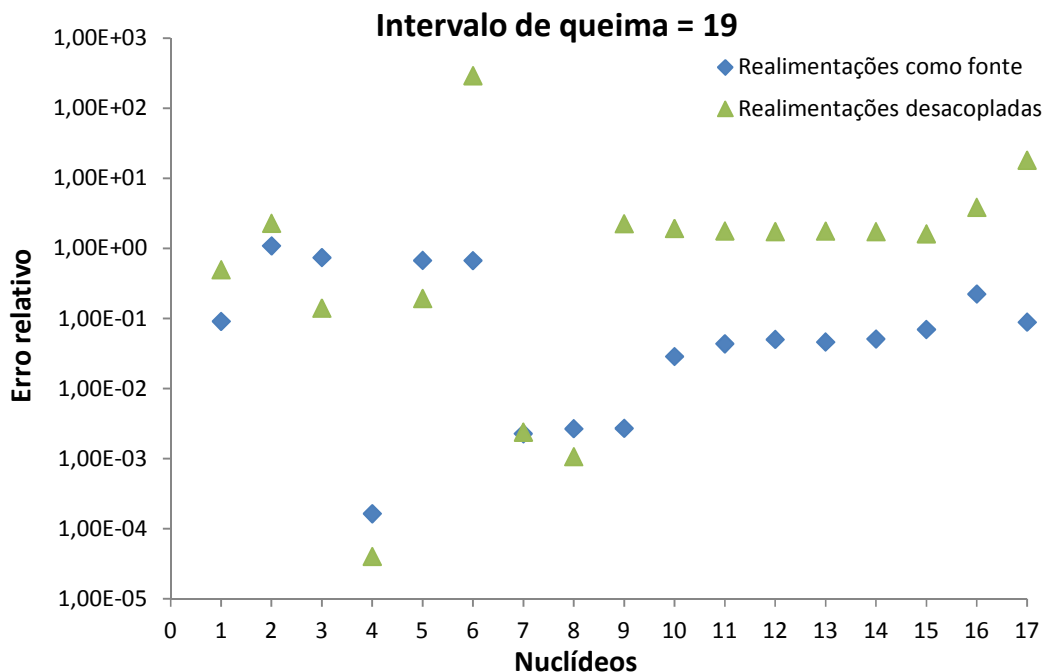


Figura 5.37: Erro relativo das concentrações isotópicas de todos os nuclídeos da cadeia no 19º intervalo de queima.

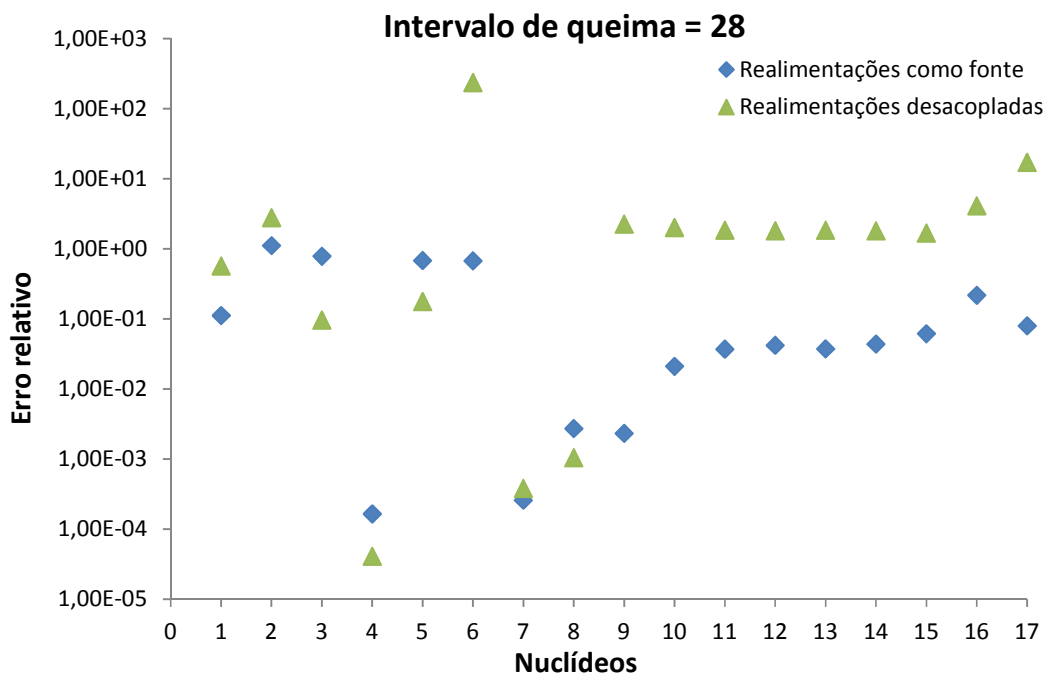


Figura 5.38: Erro relativo das concentrações isotópicas de todos os nuclídeos da cadeia no 28º intervalo de queima.

Nas Tabelas 5.3 e 5.4, agrupamos os nuclídeos por faixa de valores dos erros relativos, para as duas metodologias, referentes às Figuras 5.35 a 5.38.

Tabela 5.3: Número de nuclídeos situados em faixas de valores de erro relativo utilizando o método “Realimentações como fonte”.

Intervalo de queima	Número de nuclídeos					
	$\varepsilon < 10^{-2}$	$10^{-2} \leq \varepsilon < 10^{-1}$	$10^{-1} \leq \varepsilon < 10^0$	$10^0 \leq \varepsilon < 10^1$	$10^1 \leq \varepsilon < 10^2$	$\varepsilon \geq 10^2$
1	3	0	14	0	0	0
4	1	3	10	3	0	0
7	2	3	12	0	0	0
10	3	4	10	0	0	0
13	3	7	7	0	0	0
16	4	7	6	0	0	0
19	4	8	4	1	0	0
22	4	8	4	1	0	0
25	4	8	4	1	0	0
28	4	8	4	1	0	0

Tabela 5.4: Número de nuclídeos situados em faixas de valores de erro relativo utilizando o método “Realimentações desacopladas”.

Intervalo de queima	Número de nuclídeos					
	$\varepsilon < 10^{-2}$	$10^{-2} \leq \varepsilon < 10^{-1}$	$10^{-1} \leq \varepsilon < 10^0$	$10^0 \leq \varepsilon < 10^1$	$10^1 \leq \varepsilon < 10^2$	$\varepsilon \geq 10^2$
1	3	3	2	8	0	1
4	2	2	8	4	0	1
7	3	0	4	8	1	1
10	3	0	4	8	1	1

13	3	0	3	9	1	1
16	3	0	3	9	1	1
19	3	0	3	9	1	1
22	3	0	3	9	1	1
25	3	0	3	9	1	1
28	3	1	2	9	1	1

Apenas como compactação dos dados contidos nas Tabelas 5.3 e 5.4, apresentamos na Tabela 5.5 o percentual dos nuclídeos, em relação ao total, de acordo com os erros relativos das concentrações isotópicas calculadas pelas duas metodologias tomando como referência o método “Exponencial”.

Tabela 5.5: Percentual total de nuclídeos em função dos erros relativos das concentrações isotópicas para cada intervalo de queima.

Intervalo de queima	Percentual de nuclídeos							
	Ordens de grandeza dos erros relativos usando o método “Realimentações como fonte”				Ordens de grandeza dos erros relativos usando o método “Realimentações desacopladas”			
	< 0	< 1	< 2	< 3	< 0	< 1	< 2	< 3
	1	100%	-	-	-	41,3%	94,1%	-
4	82,6%	100%	-	-	70,8%	94,1%	-	100%
7	100%	-	-	-	41,3%	88,2%	94,1%	100%
10	100%	-	-	-	41,3%	88,2%	94,1%	100%
13	100%	-	-	-	35,4%	88,2%	94,1%	100%
16	100%	-	-	-	35,4%	88,2%	94,1%	100%
19	94,1%	100%	-	-	35,4%	88,2%	94,1%	100%
22	94,1%	100%	-	-	35,4%	88,2%	94,1%	100%
25	94,1%	100%	-	-	35,4%	88,2%	94,1%	100%
28	94,1%	100%	-	-	35,4%	88,2%	94,1%	100%

Analisando a Tabela 5.5 podemos perceber que a metodologia onde as realimentações são tratadas como fonte das equações apresentou resultados altamente

satisfatórios uma vez que as concentrações isotópicas calculadas, em quase sua totalidade ao longo de todo o período de queima, resultaram em erros relativos menores que  $10^0$ , caracterizando concentrações com ordens de grandezas semelhantes ou no máximo diferentes por uma unidade em relação às concentrações isotópicas do método “Exponencial”. Por outro lado, as concentrações isotópicas utilizando o método “Realimentações desacopladas” destoaram mais significativamente, para cerca da metade dos núclídeos, resultando em uma faixa de erro relativo entre  $10^0$  e  $10^1$ . Esse aumento no número de núclídeos com um erro maior também pode ser justificado pelo fato de no método “Realimentações desacopladas” além de termos aproximado os termos fonte das equações acopladas por meio de reações, também houve uma aproximação nas concentrações isotópicas que no método “Realimentações como fonte” são calculadas por suas respectivas expressões.

## 6 Conclusões

O trabalho apresentado nesta tese abordou aspectos relevantes relacionados às equações de depleção caracterizando as concentrações isotópicas dos actínídeos mais importantes para o controle do reator, utilizando uma metodologia onde a cadeia de actínídeos foi resolvida analiticamente. Na formulação proposta, houve o tratatamento das realimentações que ocorrem entre tais nuclídeos por meio de reações de decaimento alfa e reações  $(n, 2n)$  associada com o conceito de subintervalos de queima.

Os três problemas iniciais que guiaram a elaboração desta tese, apontados no capítulo 1, foram resolvidos satisfatoriamente. A metodologia de desacoplamento entre duas equações diferenciais de primeira ordem, associada com a alternância da resolução desse sistema para diferentes pares de nuclídeos e a divisão dos intervalos de queima em subintervalos de queima, mostrou-se eficaz. As concentrações isotópicas negativas, encontradas no uso de soluções analíticas, entre os últimos nuclídeos posicionados no final da cadeia, para os primeiros intervalos de queima, foram contornadas através de um refinamento na malha, onde na parte corretora o número de subintervalos poderia ser maior que o número de subintervalos da parte preditora, permitindo assim uma maior flexibilização nos cálculos. Por último, foi possível trabalharmos com a cadeia de actínídeos completa, considerando todas as realimentações que ocorrem por meio de reações de decaimento alfa e reações  $(n, 2n)$ , ora os considerando como termos fontes dos sistemas de equações (seção 4.3.1), ora os desacoplando seguindo a metodologia proposta na seção 4.3.2.

Os resultados obtidos mostraram-se conclusivos, demonstrando que a formulação de subintervalos de queima dentro de um procedimento preditor-corretor foi adequada. O método intitulado “Realimentações como fonte” apresentou alto grau de exatidão numérica, uma vez que quase todos os nuclídeos, em praticamente todos os intervalos de queima, apresentaram valores de concentrações isotópicas da mesma, ou com a diferença de apenas uma, ordem de grandeza do método “Exponencial” considerado como referência. Por outro lado, as concentrações calculadas pelo método “Realimentações desacopladas” apresentaram uma leve divergência, excetuando o sexto nuclídeo, onde cerca da metade dos nuclídeos presentes na cadeia resultaram em valores

diferentes por uma ou duas ordens de grandeza das concentrações isotópicas calculadas pelo método “Exponencial”. Nessa pequena discrepância observada, consideramos que foi decisiva a influência dos termos fontes utilizados nos conjuntos dos sistemas de equações acopladas, levando a um maior erro quando comparado à metodologia “Realimentações como fonte”.

Uma sugestão de trabalho futuro seria a generalização da metodologia de desacoplamento apresentada no capítulo 4. Caso exista, ou seja deduzido, um análogo matricial, do teorema apresentado no referido capítulo, seria possível, por exemplo, o tratamento de um sistema de equações diferenciais de ordem superior a  $2 \times 2$ . Adicionalmente, com essa generalização, não mais haveria os termos fontes dos sistemas de equações, reduzindo assim o erro no cálculo das concentrações. Mesmo diante dessa hipótese, onde se estaria lidando com um sistema de equações diferenciais de, por exemplo, ordem  $17 \times 17$ , caberia uma ponderação da necessidade ou não da utilização do revezamento dos subintervalos ímpares e pares como recurso à abordagem do problema das concentrações negativas que possivelmente possam ser encontradas entre os primeiros intervalos de tempo para os nuclídeos cujas concentrações isotópicas iniciais possuam baixas ordens de grandeza. Uma outra proposta, consequência da primeira, seria abordar o conjunto completo de equações dos actínídeos e dos produtos de fissão, uma vez que tais equações são acopladas, com a possível metodologia desenvolvida.



# Referências Bibliográficas

- ABOANBER, A. E., 2001, “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.
- ARAGONES, J.M., AHNERT, C., “A Linear Discontinuous Finite Difference Formulation for Synthetic Coarse-Mesh Few-Group Diffusion Calculations”. *Nuclear Science and Engineering*, v.94, pp. 309-322, 1986.
- BATEMAN, H., 1910, “Solution of a system of differential equations occurring in the theory of radio-active transformations,” *Math. Proc. Cambridge*, v.15, pp. 423-427.
- CETNAR, J., 2006, “General solution of Bateman equations for nuclear transmutations”, *Annals of Nuclear Energy*, v.33, pp. 640-675.
- CETNAR, J., WALLENIS, J., GUDOWSKI, W., “*MCB: a continuous energy Monte Carlo Burnup simulation code*” , Proceedings of the Fifth Information Exchange Meeting on Actinide and Fission Product Partitioning and Transmutation. Mol., Belgium, 25-27 November, 1998.
- DAVID, B., 2004, *Nuclear Energy – Principles, Practices, and Prospects*. 2 ed. New York, Springer-Verlag
- DEVOOGHT, J., 1980, “Quasistatic Solutions of Reactor Kinetics, *Annals of Nuclear Energy*”,v. 7, n. 1, pp. 47-58.
- DEVOOGHT, J., MUND, E.H., 1980, “Generalized Quasistatic Method for Space-Time Kinetics”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 76 (Out.), pp. 10-17.
- DUDERSTADT, J.J., HAMILTON, L.J., 1975, *Nuclear Reactor Analysis*. 1 ed. New York, John Wiley & Sons, Inc.
- DULLA,S., MUND , E.H., RAVETTO , P., 2008, “The quasi-static method revisited”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 50, n. 8 ( Nov.), pp. 908-920.
- FINEMANN, H., BENNERITZ, F., WAGNER, M.R., 1977, “Interface current techniques for multidimensional reactor calculations”, *Atomkernenergie*, v. 30, n. 123.
- FORREST, R.A., 1997. *EASY-97: Overview*. EASY Documentation series. Oxfordshire, UK, UKAEA Fusion.
- GOLUOGLU , S., DODDS, H. L., 2001, “A Time-Dependent, Three-Dimensional Neutron Transport Methodology”, *Nuclear Science and Engineering*,v. 139, n. 3 (Nov.), pp. 248-261.

GROSSMAN , L.M., STEIN, W., The calculation of the decay heat of fission product from exact relations, NP-616, Vol. 2, Electric Power Research Institute, 1978.

GULA, A., *Acta Phys. Pol.* B16, 589, 1985.

HENRY, F.,1986, *Nuclear Reactor Analysis*, 1 ed. Cambridge: Mit Press.

ISOTALO, A., 2013, *Computational Methods for Burnup Calculations with Monte Carlo Neutronics*. Doctoral dissertation, Aalto University, Espoo, Finland.

ISOTALO, A.E., AARNIO, P.A., 2011 “Comparison of depletion algorithms for large systems of nuclides”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 38, n.2-3 (Fev.-Mar.), pp. 261-268.

KIM, YEONG-IL., KIM, YOUNG-JIN., KIM, SANG-JI., TAEK-KYUM., 1999, “A semi-analytic multigroup nodal method”. *Annals of Nuclear Energy*, v. 26, pp. 699-708.

LAMARSH, J.R., BARATTA, J.A., 2001, *Introduction to Nuclear Engineering*. 2 ed. New Jersey, Prentice Hall.

LARSEN, M.E., JENSEN, B.S., 1989, “Coupled Linear Differential Equations with Real Coefficients”, *The American Mathematical Monthly*, v. 96, n.8, pp. 727-731.

LEWIS, E.L., 2008, *Fundamentals of Nuclear Reactor Physics*. 1 ed. New York, Academic Press.

M. SEGEV, H. HUSTERS, S. PELLONI, 1996, “Transmutation of neptunium, americium, technetium and iodine in fast spectrum cores driven by accelerated protons”, *Nucl. Sci. Eng.*, v. 122, n 1(Jan.), pp. 105-120.

MARTINEZ, A.S., SILVA, F.C., “Aceleração do Método de Expansão Nodal usando Diferenças Finitas de Malha Grossa”, VI Encontro de Modelagem Computacional, Nova Friburgo, RJ, Brasil, 1 a 3 de dezembro, 2003.

MATHEWS, G.L., WARD, R.A., *Rep. Prog. Phys.* 48, 137, 1985.

MILES., R.E., 1981, “An Improved Method for Treating Problems Involving Simultaneous Radioactive decay, Buildup, and Mass Transfer”, *Nucl. Sci. Eng.*, v. 79, n. 2 (Out.), pp. 239-245.

MIRZADEH, S., R.E., CALLAHAN , A.P., KNAPP, F.F., Production Capabilities in US Nuclear Reactors for Medical Radioisotopes, ORNL/TM-12010, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, TN,1992.

MOLER, C., LOAN, C. V., 1978, “Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix”, *Society for Industrial Applied Mathematics*, v.20, n. 4.

MORIMOTO , Y., MARUYAMA , H., ISHII, K., *et al.*, 1989, “Neutronic analysis code for fuel assembly using a vectorized Monte Carlo method”, *Nucl. Sci. Eng.*, v. 103, n. 4 (Dec), pp. 351-358.

- MORSS, L.R. *et al.*, 2010, *The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements*. 4 ed. Netherlands, Springer.
- MORSS, L.R., Edelman, N.M., FUGER, J., 2010, *The Chemistry of the Actinide and Transactinide Elements*. 4 ed. Netherlands, Springer.
- NEITZEL, I., “Um procedimento Rápido e Eficiente para Cálculo da Matriz de Transição”, Comunicação Interna, COPPE, 1987.
- NERAC, 2002. *A technology roadmap for generation IV nuclear energy systems: Ten nations preparing today for tomorrow’s energy needs*. U.S. Department of Energy’s Nuclear Energy Research Advisory Committee. GIF-002-00.
- NICOLAU, A.S., 2014, *Algoritmo Evolucionário de Inspiração Quântica Aplicado na Otimização de Problemas de Engenharia Nuclear*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- OH, HYUNG-SUK, YANG W.S., 1999, “Comparison of Matrix Exponential Methods for Fuel Burnup Calculations”, *Journal of the Korean Nuclear Society*, v. 31, n.2 (Abr.), pp. 172-181.
- OLIVEIRA, D.L., DAMASCENO, R.M., BARROS,R.C., 2012, “Application of the Laplace Transform Method for Computational Modeling of Radioactive Decay Series”, *Kerntechnik*, v.77, n.1, pp. 64-67.
- OTT, K.O., MENELEY, D.A., 1969, “Accuracy of the Quasistatic Treatment of Spatial Reactor Kinetics”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 36, pp. 402-411.
- PARLETT, B.N., 1976, “A recurrence among the elements of functions of triangular matrices”, *Linear Algebra Appl.*, v.14, pp. 117-121.
- PELOWITZ, D.B., MCNPX 2.6.0 Manual., LA-CP-07-1473, 2008.
- PESSOA, P.I.O., 2014, *Métodos para Reconstrução da Distribuição da Densidade de Potência Nuclear Nuclear*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- PLANT, J.B., 1968, “On the Computation of Transition Matrices for Time-Invariant Systems”, *Proc. IEEE*, v.56, pp. 1397-1398.
- PRATA, F.S., 2011, *Solução das Equações de Depleção Isotópica usando o Método da Decomposição e Soluções analíticas*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- PRATA, F.S., 2013, “Solution of the Isotopic Depletion Equations using Decomposition Method and Analytical Solutions”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 69, pp. 53-58.

- PRESSYANOV, S.D., 2002, “Short solution of the radioactive decay chain equations,” *Am.J.Phys.*, v.70, n.4 (Abr.),
- PUSA, M., 2013, *Numerical methods for nuclear fuel burnup calculations*. Doctoral dissertation, Aalto University, Espoo, Finland.
- PUSA, M., LEPPANEN, J., 2010, “Computing the Matrix Exponential in Burnup Calculations”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 164, n.2 (Fev.), pp. 140–150.
- RAYKIN, M.S., SHLYAKHTER, A.I., 1989, “Solution of nuclide burnup equations using transition probabilities”, *Nucl. Sci. Eng.*, v. 102, pp. 54-63.
- SALVATORES, M., SLESSAREV, I., UEMATSU, M., 1994, “A Global Physics Approach to Transmutation of Radioactive Nuclei”, *Nucl. Sci. Eng.*, v. 116, n. 1 (Jan.), pp. 1-18.
- SEKIMOTO, H., *Nuclear Reactor Theory*, Textbook, 2007. Disponível em: <http://www.nr.titech.ac.jp/coe21/eng/events/NuclReactorTheoryTextbook.pdf>. Acesso em: 27 nov. 2015.
- SILVA, F.C., ALVIM, A.C.M., MARTINEZ, A., “Depletion Calculation for a Nodal Reactor Physics code”, *ICONE18*, 2010.
- SOUZA, M.B., BERTOLI, S.L., “Um procedimento numérico para o cálculo de matrizes de transição”, Unpublished notes.
- STACEY, W.M., 2007, *Nuclear Reactor Physics*, 2 ed. Weinheim, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- SYED, M.G., 2009, *The Computation of Matrix Functions in Particular, the Matrix Exponential*. Ph.D. dissertation, University of Birmingham, Edgbaston, Birmingham, United Kingdom.
- VUKADIN, Z., 1994, “Solution of depletion chain equations using nonsingular Bateman coefficients”, *Nucl. Sci. Eng.*, v. 117, n. 2 (Jan.), pp. 121-125.
- YAMAMOTO, A., TATSUMI, M., SUGIMURA, N., 2007, “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.
- ZWEIFEL, P.F., 1973, *Reactor Physics*. 1 ed. New York, McGraw-Hill, Inc.