

DUAS METODOLOGIAS DE CÁLCULO DO FLUXO DE NÊUTRONS PARA O  
PROBLEMA DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA EM SISTEMA SUBCRÍTICO GUIADO  
POR FONTE EXTERNA DE NÊUTRONS EM ESTRUTURA DE MALHA GROSSA

Thiago Freitas Belo

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: Fernando Carvalho da Silva

Rio de Janeiro

Abril de 2022

DUAS METODOLOGIAS DE CÁLCULO DO FLUXO DE NÊUTRONS PARA O  
PROBLEMA DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA EM SISTEMA SUBCRÍTICO GUIADO  
POR FONTE EXTERNA DE NÊUTRONS EM ESTRUTURA DE MALHA GROSSA

Thiago Freitas Belo

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

Orientador: Fernando Carvalho da Silva

Aprovada por: Prof. Fernando Carvalho da Silva

Prof. Aquilino Senra Martinez

Prof. Antônio Carlos Marques Alvim

Prof. Hermes Alves Filho

Prof. Ricardo Carvalho de Barros

RIO DE JANEIRO, RJ BRASIL

ABRIL DE 2022

Belo, Thiago Freitas.

Duas Metodologias de Cálculo do Fluxo de Nêutrons para o Problema de Depleção Isotópica em Sistema Subcrítico Guiado por Fonte Externa de Nêutrons em Estrutura de Malha Grossa/ Thiago Freitas Belo. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2022.

XVI, 96 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Fernando Carvalho da Silva.

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 91-96.

1. Expansão em Pseudo-Harmônicos. 2. Diferenças Finitas de Malha Grossa. 3. Cálculo de depleção isotópica. 4. Sistemas subcríticos guiados por fonte externa de nêutrons.

I. Silva, Fernando Carvalho da. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear.

III. Título.

*"One, remember to look up at the stars and not down at your feet.*

*Two, never give up work.*

*Work gives you meaning and purpose and life is empty without it.*

*Three, if you are lucky enough to find love,  
remember it is there and don't throw it away."*

*Stephen Hawking*

*À memória de minha avó, Orfelina Cuadro de Freitas,  
pois aos seus olhos sempre fui seu doutorzinho.*

# Agradecimentos

Enfim o longo e árduo caminho percorrido chegou ao seu grato fim. Caminho este de muito aprendizado e muita evolução. Ao longo do mesmo, tive a oportunidade de conhecer muita gente disposta a me ajudar, seja com a pesquisa ou com o apoio emocional. Quero aproveitar este espaço para agradecer a estas pessoas que aqui descrevo.

Gostaria de agradecer imensamente ao meu orientador, Fernando Carvalho da Silva, pelo seu tempo, ensinamentos e atenção. Seu conhecimento, dedicação e paixão pela área são louváveis e me motivaram a continuar a buscar pela ciência. Nossas demoradas reuniões me permitiram entender conceitos e desenvolver o pensamento crítico, tanto na área nuclear quanto em relação a assuntos do cotidiano.

Agradeço à minha esposa, Manoella Bueno Flores. Sem ela, eu teria sucumbido. Ela me deu forças pra continuar, sempre me apoiando com carinho e alento. Escutou meus medos e anseios e sempre soube falar o que precisava ouvir para não desistir de meus sonhos. Seu companheirismo e amor estão entrelaçados em cada linha deste trabalho. Seu abraço me trouxe o conforto que precisei em tantos momentos.

Agradeço à minha mãe, Miriam Cristina Cuadro de Freitas, por todo o suporte emocional. Pelos conselhos e pela crença. Pelos colos, pelos puxões de orelha quando mereci e por estar sempre por perto quando precisei, mesmo que esse “perto” fosse a uma ligação de distância. Agradeço ao meu pai, Valdemir Jacó Correa Cardozo, e ao meu avô, Jorge Antônio de Freitas, pelas palavras de força e pelo orgulho que sempre vi em seus olhos. Agradeço aos meus irmãos, Diogo Cuadro de Freitas Santos Leite e Rafael Brito Feck, pela amizade e amor. Também agradeço a minha sogra, Janice Teresinha Flores, meu cunhado, Caio Fernando Flores Coelho, e meu concunhado Luan Ott, pelo carinho.

Agradeço ao meu amigo, Wemerson de Carvalho Gonçalves, por todo conhecimento e ajuda com FORTRAN, física de reatores, informática e pelo companheirismo em todos esses anos que passei na UFRJ. Sua amizade significa muito pra mim.

Agradeço aos amigos, Aline Sousa, Anna Carolina Mezashi, Arthur Walber Viana, Fagner Chagas Rother, Gabrielle Toniolo, Isabela Medeiros, Thiago Ávila de Medeiros e Thainá Cristine Moura, por todos esses anos de amizade e carinho. Com vocês a vida se torna mais leve e bela.

Agradeço aos amigos que fiz no PEN e levarei comigo, Alice Sant'Anna Albuquerque, Ana Carolina Pereira de Oliveira, Beatriz Machado dos Santos, Débora Montano Trombetta, Gabriel Caetano Gomes Ribeiro Da Silva e Wallthynay Ferreira de Arruda.

A todos os funcionários do programa de Engenharia Nuclear (PEN) da COPPE, que sempre me atenderam com boa vontade e paciência, em especial à Liliane (Lili), Washington, Reginaldo, Josevalda (Jô) e Suzana.

Aos membros da banca por aceitarem participar da minha banca, dedicando parte de seus tempos na leitura e sugestões para o aprimoramento desta tese.

Ao CNPq pelo auxílio financeiro que possibilitou a realização deste trabalho.

Por fim, agradeço a todos que de alguma forma, contribuíram positivamente com este trabalho.

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

DUAS METODOLOGIAS DE CÁLCULO DO FLUXO DE NÊUTRONS PARA O PROBLEMA DE DEPLEÇÃO ISOTÓPICA EM SISTEMA SUBCRÍTICO GUIADO POR FONTE EXTERNA DE NÊUTRONS EM ESTRUTURA DE MALHA GROSSA

Thiago Freitas Belo

Abril/2022

Orientador: Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

O cálculo de depleção isotópica é normalmente realizado usando a aproximação quase-estática. Nessa aproximação, o fluxo de nêutrons é assumido como constante, ao longo dos intervalos de tempo em que o ciclo de queima é dividido. Nesta tese, duas diferentes metodologias de cálculo são propostas para a obtenção do fluxo de nêutrons para a solução do problema de depleção isotópica em sistemas subcríticos acionados por fonte externa de nêutrons, em uma estrutura de malha grossa. As chamadas Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com DFMG e Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com PHE. Nessas metodologias, o fluxo de nêutrons no início de cada intervalo de queima é calculado com os métodos das Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG) e da Expansão em Pseudo-Harmônicos (PHE), respectivamente. A aplicabilidade de ambas as metodologias é verificada através da simulação de dois reatores do tipo ADS: um reator de porte pequeno de 45 MW com um ciclo de queima de 90 dias e outro de porte grande de 800 MW com um ciclo de queima de 600 dias. O mecanismo de ajuste de subcriticalidade, aplicado em ambas as simulações, foi baseado no fator de multiplicação efetivo, através da solução da equação de difusão de nêutrons com o Método de Expansão Nodal (NEM). Além das concentrações isotópicas, a densidade de potência média e a intensidade da fonte externa de nêutrons foram avaliadas ao longo do ciclo de queima. Os resultados numéricos obtidos para ambas as metodologias apresentaram uma boa concordância entre si.



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

TWO DIFFERENT METHODOLOGIES FOR NEUTRON FLUX CALCULATION  
FOR USING IN THE ISOTOPIC DEPLETION PROBLEM IN SUBCRITICAL  
SYSTEM DRIVEN BY AN EXTERNAL NEUTRON SOURCE IN A COARSE-  
MESH FRAMEWORK

Thiago Freitas Belo

April/2022

Advisor: Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

The isotopic depletion calculation is typically solved by using the quasi-static approximation. In this approximation, the neutron flux along the time steps in which the burn-up cycle is divided is assumed as constant. This work proposes two different calculation methodologies to obtain the neutron flux, used in the isotopic depletion calculation in subcritical systems driven by an external neutron source, in a coarse mesh framework. The so-called depletion calculation methodology with Coarse Mesh Finite Difference (CMFD) and depletion calculation methodology with Pseudo-Harmonic Expansion (PHE). In these methodologies, the neutron flux at the beginning of each burn-up step is calculated with CMFD and the PHE methods, respectively. In order to verify the applicability of both methodologies to an ADS-type reactor, it is simulated a 45 MW small-reactor with burn-up cycle of 90 days, and an 800 MW large-reactor with burn-up cycle of 600 days. The subcriticality adjustment mechanism is based on the effective multiplication factor, solving the neutron diffusion equation with the Nodal Expansion Method (NEM). In addition, the averaged power density and the intensity of the neutron source are evaluated throughout the burn-up cycle. The results obtained by both methodologies are in good agreement with each other.

# Sumário

<b>1 Introdução .....</b>	<b>1</b>
1.1 Divisão do Trabalho .....	6
<b>2 Problema de Depleção Isotópica .....</b>	<b>8</b>
2.1 Introdução .....	8
2.2 Equação de Depleção Isotópica .....	10
2.3 Equação para o Fluxo de Nêutrons .....	13
2.4 Tratamento da Fonte Externa de Nêutrons .....	15
<b>3 Ajuste de Subcriticalidade .....</b>	<b>19</b>
3.1 Introdução .....	19
3.2 Método da Expansão Nodal .....	20
3.2.1 Equações de Acoplamento Nodal .....	23
3.2.2 Coeficientes da Fuga Transversal .....	26
3.2.3 Coeficientes Primários .....	28
3.2.4 Coeficientes Secundários .....	30
3.2.5 Correntes Parciais de Saída .....	31
3.2.6 Equação para o Fluxo Médio Nodal .....	32
3.3 Mecanismo de Ajuste de Subcriticalidade .....	35
<b>4 Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com DFMG .....</b>	<b>38</b>
4.1 Introdução .....	38
4.2 Método das Diferenças Finitas de Malha Grossa .....	39
4.3 Fluxograma de Cálculo de Depleção com DFMG .....	47

<b>5 Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com PHE .....</b>	<b>50</b>
5.1 Introdução .....	50
5.2 Método de Expansão em Pseudo-Harmônicos .....	51
5.3 Fluxograma de Cálculo de Depleção com PHE .....	54
<b>6 Apresentação e Análise dos Resultados .....</b>	<b>56</b>
6.1 Introdução .....	56
6.2 Apresentação dos Núcleos Teste .....	56
6.3 Resultados para o Núcleo A .....	67
6.4 Resultados para o Núcleo B.....	78
6.5 Comparação entre Custos Computacionais .....	87
<b>7 Conclusões .....</b>	<b>88</b>
<b>Referências Bibliográficas .....</b>	<b>91</b>

# Lista de Figuras

Figura 2.1: Discretização temporal do ciclo de operação do reator. ....	9
Figura 3.1 - Representação de um nodo $n$ arbitrário e suas dimensões. ....	21
Figura 3.2 - Área transversal à direção $u$ . ....	24
Figura 3.3: Sequência de cálculo nodal utilizando o NEM. ....	34
Figura 3.4: Sequência de cálculo para verificação de convergência. ....	35
Figura 3.5: Sequência de cálculo do mecanismo de ajuste de subcriticalidade. ....	37
Figura 4.1: Representação de um nodo genérico $n$ e seus nodos vizinhos. ....	40
Figura 4.2: Sequência de cálculo nodal utilizando o DFMG. ....	47
Figura 4.3: Sequência de cálculo de depleção isotópica usando o DFMG.....	49
Figura 5.1: Sequência de cálculo de depleção isotópica usando o PHE.....	55
Figura 6.1: Configuração do núcleo A. ....	57
Figura 6.2: Configuração do núcleo B.....	58
Figura 6.3: Cadeia de depleção dos actínídeos.....	59
Figura 6.4: Cadeia de depleção dos produtos de fissão (PF).....	59
Figura 6.5: Comportamento do $k_{eff}$ ao longo do tempo, núcleo A.....	68
Figura 6.6: Comportamento da potência de operação do sistema para a intensidade da fonte externa de nêutrons fixa ao longo do tempo, núcleo A.....	69
Figura 6.7: Comportamento da intensidade da fonte externa de nêutrons para a potência de operação do sistema fixa ao longo do tempo, núcleo A. ....	69
Figura 6.8: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo A, para a condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante.....	71
Figura 6.9: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo A, para a condição de potência de operação do sistema constante. ....	71

Figura 6.10: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.....	72
Figura 6.11: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.....	72
Figura 6.12: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.....	73
Figura 6.13: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.....	73
Figura 6.14: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.....	74
Figura 6.15: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.....	74
Figura 6.16: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.....	75
Figura 6.17: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.....	75
Figura 6.18: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.....	76
Figura 6.19: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.....	76
Figura 6.20: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.....	77
Figura 6.21: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.....	77
Figura 6.22: Distribuição de potência do núcleo A em $t\ell = 15$ dias, em $W/cm^3$ .....	78
Figura 6.23: Comportamento do keff ao longo do tempo, núcleo B.....	80
Figura 6.24: Comportamento da potência de operação do sistema para a intensidade da fonte externa de nêutrons fixa ao longo do tempo, núcleo B.....	81

Figura 6.25: Comportamento da intensidade da fonte externa de nêutrons para a potência de operação do sistema fixa ao longo do tempo, núcleo B. ....	81
Figura 6.26: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo B, para a condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante.....	82
Figura 6.27: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo B, para a condição de potência de operação do sistema constante. ....	82
Figura 6.28: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B. ....	83
Figura 6.29: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B. ....	83
Figura 6.30: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B. ....	84
Figura 6.31: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B. ....	84
Figura 6.32: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.....	85
Figura 6.33: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.....	85
Figura 6.34: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.....	86
Figura 6.35: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.....	86
Figura 6.36: Distribuição de potência do núcleo B em $t\ell = 550$ dias, em $W/cm^3$ . ....	87

# Lista de Tabelas

Tabela 6.1: Produção dos produtos de fissão. ....	60
Tabela 6.2: Constantes de decaimento, em $s^{-1}$ .....	60
Tabela 6.3: Seções de choque microscópicas para o elemento combustível FA01, em $barn$ .....	61
Tabela 6.4: Seções de choque microscópicas para o elemento combustível FA02, em $barn$ .....	62
Tabela 6.5: Seções de choque microscópicas para o elemento combustível FA03, em $barn$ .....	63
Tabela 6.6: Seções de choque microscópicas para o elemento combustível FA04, em $barn$ .....	64
Tabela 6.7: Seção de choque microscópica da reação $n2n$ do $^{238}U$ , $\sigma_{n2n}$ , gU238, em $barn$ .....	65
Tabela 6.8: Energia liberada por fissão, em <i>Joule</i> .....	65
Tabela 6.9: Seções de choque macroscópicas das regiões dos refletores e ENS, em $cm^{-1}$ .....	66
Tabela 6.10: Seções de choque macroscópicas para o núcleo A, em $cm^{-1}$ .....	66
Tabela 6.11: Seções de choque macroscópicas para o núcleo B, em $cm^{-1}$ .....	66
Tabela 6.12: Concentrações iniciais dos nuclídeos do núcleo A, em <i>átomos/barn·cm</i> .....	67
Tabela 6.13: Intervalos de queima para o núcleo A. ....	67
Tabela 6.14: Concentrações iniciais dos nuclídeos do núcleo B, em <i>átomos/barn·cm</i> .....	78
Tabela 6.15: Intervalos de queima para o núcleo A. ....	79
Tabela 6.16: Custo computacional gasto em cada simulação, em $s$ .....	87

# Lista de siglas

ADS	<i>Accelerator-Driven Systems</i>
AM	Actinídeos menores
BOC	Início do ciclo de queima
BWR	Reator de água fervente
CANDU	Reator de água pesada pressurizada
CNFR	Código Nacional de Física de Reatores
DFMG	Diferenças Finitas de Malha Grossa
ENS	Fonte externa de nêutrons
EOC	Final do ciclo de queima
FA	Elemento combustível
GEE	Gases de efeito estufa
IAE	Agência Internacional de Energia
IPCC	Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas
NEM	Método de Expansão Nodal
OCDE	Organização para Cooperação e Desenvolvimento Econômico
PF	Produtos de fissão
PHE	Expansão em Pseudo-Harmônicos
PWR	Reator de água leve pressurizada
SNF	Combustível nuclear irradiado
STRM	Material estrutural
TRU	Transmutação de transurânicos
UNFCCC	Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre a Mudança do Clima



# 1 Introdução

Uma crescente preocupação com o meio ambiente e com o futuro da geração de energia elétrica tem tomado conta das discussões políticas da atualidade. O aumento das concentrações atmosféricas de gases de efeito estufa (GEE) está causando mudanças nas temperaturas globais e regionais, fazendo com que haja um crescimento de risco de eventos climáticos extremos e aumento do nível do mar, impactando na saúde, meios de subsistência, segurança alimentar e abastecimento de água, bem como a biodiversidade terrestre e oceânica (FIELD *et al.*, 2014, MASSON-DELMOTTE *et al.*, 2018). Este aumento tem-se verificado quase continuamente desde o início da revolução industrial e quase dobrado desde 1970. A produção e o uso de energia representam atualmente cerca de dois terços das emissões totais de GEE, e a geração de eletricidade, por sua vez, é responsável por um terço dessas emissões relacionadas com a energia (IAEA, 2020a). As emissões do setor elétrico estão crescendo rapidamente e mais do que triplicaram desde 1970.

Em resposta a esta ameaça global, durante a COP21, 195 países aprovaram em 2015 o Acordo de Paris. Este Acordo é um tratado no âmbito da Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre a Mudança do Clima (UNFCCC), que rege medidas de redução de GEE a partir de 2020, a fim de conter o aquecimento global, limitando o aumento médio de temperatura global a 2°C, quando comparado a níveis pré-industriais, e prosseguir os esforços para limitar este aumento ainda mais, para 1,5°C.

De acordo com o Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas (IPCC) (MASSON-DELMOTTE *et al.*, 2018), a fim de limitar o aumento da temperatura média global a 1,5°C, a produção e o uso de energia global precisam ser totalmente descarbonizados por volta de 2050, com rápidas reduções de emissões começando imediatamente. O setor de eletricidade enfrenta o imenso desafio de mudar quase que inteiramente para fontes de energia de baixo carbono em apenas 30 anos, visto que atualmente o sistema é dominado por combustíveis fósseis.

Cerca de 70% da eletricidade do mundo atualmente vem da queima de combustíveis fósseis (IEA, 2020), de acordo com a Agência Internacional de Energia

(IAE), um órgão especial da Organização para Cooperação e Desenvolvimento Econômico (OCDE). Em 2050, cerca de 80% de toda a eletricidade precisará ser de baixo carbono para cumprir a meta do Acordo de Paris. A implantação significativamente maior e mais rápida de tecnologias de energia de baixo carbono, junto com a eliminação de fontes intensivas de emissão, requer que todas as opções sejam consideradas.

Como uma fonte de energia de grande escala, confiável, concentrada e de baixo carbono, a energia nuclear tem contribuído significativamente nas últimas décadas. Os 442 reatores nucleares atualmente em operação em 30 países geram 10% da eletricidade do mundo e fornecem quase 30% da eletricidade de baixo carbono (IEA, 2019a, IAEA, 2020b), evitando a emissão de aproximadamente 2 Gt de CO<sub>2</sub> a cada ano. De acordo com quatro cenários avaliados no relatório desenvolvido pelo IPCC (MASSON-DELMOTTE *et al.*, 2018), até 2050 haverá um aumento de 100-500% na geração nuclear global. O papel da energia nuclear também é reconhecido em um relatório recente da IAE intitulado “Energia Nuclear em um Sistema de Energia Limpa” (IEA, 2019b). Além da geração de eletricidade, a energia nuclear pode dar uma contribuição significativa para a descarbonização do setor de energia não elétrica, empreendimento que se mostra mais desafiador. Por exemplo, a participação dos combustíveis fósseis poluentes na matriz energética global ainda não está diminuindo. Em 2019, ela permanecia em cerca de 60%, o mesmo nível da década de 1990 (IEA, 2019c).

Sendo assim, a energia nuclear tem grande potencial para desempenhar um papel significativo no cumprimento das metas de mitigação das mudanças climáticas e no apoio ao desenvolvimento social e econômico necessárias para a transição para uma economia global de baixo carbono.

No entanto, o crescimento da energia nuclear não está isento de problemas e é acompanhado por objeções vigorosas. Os atuais reatores nucleares comerciais (PWR, BWR e CANDU) possuem ciclo de combustível aberto, ou seja, não reciclam o combustível. Isto gera um acúmulo de combustível nuclear irradiado (SNF) que, além de urânio e plutônio, esse combustível possui uma fração de actínídeos menores (AM) e produtos de fissão (PF) de meia-vida longa extremamente radiotóxicos. Assim, existe

uma grande preocupação na utilização desses reatores, não só na prevenção de acidentes, mas também devido à proliferação de tecnologias nucleares e materiais nucleares, e a necessidade de repositórios finais de estocagem de longa duração. Essas preocupações têm sido o ponto fraco para o desenvolvimento da energia nuclear e motivo de críticas por parte da comunidade científica, bem como da opinião pública, para a aceitação da energia nuclear.

Uma forma de contornar o problema da estocagem é através da queima dos rejeitos provenientes dos reatores nucleares de potência em outros tipos de reatores. Inicialmente os reatores rápidos foram considerados para esta finalidade, por proporcionar, além de uma melhor utilização das reservas de urânio, a possibilidade de transmutação dos elementos transurânicos. Porém, devido às dificuldades na operação de reatores rápidos críticos, como por exemplo, o controle da reatividade e também a oxidação do material usado como refrigerante, fizeram que seu uso fosse dificultado.

Os chamados reatores híbridos, como o *Accelerator Driven Systems* (ADS), vieram para contornar os problemas encontrados nos reatores rápidos críticos. O ADS utiliza um conceito onde os nêutrons são produzidos a um custo elétrico pequeno através da interação de partículas aceleradas (prótons, dêuterons) com um alvo (Pb, Bi, etc.), chamada de reação de *spallation*. Os reatores ADS apresentam como vantagens uma menor probabilidade de acidentes de reatividade, alta capacidade de transmutação, baixa produção de rejeitos e melhor utilização dos recursos naturais em longo prazo.

Um ADS consiste de um sistema subcrítico, com valor de fator de multiplicação efetivo ( $k_{eff}$ ) entre 0,95 e 0,98, sendo mantido em estado estacionário por uma fonte externa de nêutrons. Seu conceito foi proposto originalmente por LAWRENCE *et al.* (1960), através da patente americana US-2933442, com o objetivo de produzir material físsil a partir de nuclídeos férteis. Tendo voltado a estar em voga com os trabalhos de BOWMAN *et al.* (1992), que propôs um conceito para a transmutação de transurânicos (TRU) e PF de meia-vida longa provenientes dos SNF, e do grupo de CARMINATI *et al.* (1993a) no CERN, cuja a proposta inicial era o *Fast Energy Amplifier*, um ADS visando a geração de energia. Posteriormente, RUBBIA *et al.* (1997) demonstrou teoricamente a capacidade deste conceito em eliminar o inventário de TRU do parque nuclear espanhol.

Há também estudos como os de Carminati *et al.* (1993b), David *et al.* (2000) e Ismail *et al.* (2008), que propõem a utilização de ADS para a produção de combustível físsil a partir de isótopos férteis, utilizando como combustível misturas baseadas em tório para a produção de  $^{233}\text{U}$  ou, em menor escala, urânio empobrecido para a conversão de  $^{238}\text{U}$  em  $^{239}\text{Pu}$ . O interesse no ciclo Th/U deve-se principalmente às extensas reservas de tório conhecidas, com o Brasil possuindo uma das maiores reservas de tório do mundo (IAEA, 2005).

Embora até o momento nenhum ADS de potência tenha sido construído, existem muitos projetos em andamento para a demonstração do conceito, tais como o MYRRHA (ABDERRAHIM *et al.*, 2001) e o XADS (CINOTTI *et al.*, 2004). A investigação é realizada através de uma série de reatores experimentais de baixa potência, tais como os experimentos do MUSE na instalação MASURCA (BILLEBAUD *et al.*, 2007), TRADE (GABRIELLI e D'ANGELO, 2009), YALINA (GOHAR e SMITH, 2010) e o reator subcrítico do KIPT, acionado por um acelerador linear de elétrons (GULEVICH *et al.*, 2008).

Além disso, vários conceitos de ADS foram propostos durante os últimos 20 anos, como a proposta do *Fast Energy Amplifier* com três alvos de *spallation* (MAIORINO *et al.*, 2001, PEREIRA, 2002), sistemas refrigerados a chumbo, como o projeto JAERI (TSUJIMOTO *et al.*, 2004), o conceito do ATW americano (BELLER *et al.*, 2001) e um ADS refrigerados a hélio (CARLUEC e ANZIEU, 1999). Estudos, tais como o realizado por SHEFFIELD (2010), mostram que a pesquisa em ADS contribuiu para a mudança da percepção pública da energia nuclear, principalmente por dar uma solução ambientalmente sustentável para a questão de combustíveis nucleares irradiados.

A presença de uma fonte externa de nêutrons introduz novas considerações em relação à descrição matemática do processo físico que ocorre no núcleo do reator nuclear. Em reatores ADS a intensidade da fonte externa de nêutrons determina a potência térmica do reator, dependendo do seu nível de subcriticalidade. A diminuição do valor do  $k_{\text{eff}}$  devido à queima do combustível deve ser compensada para manter a potência do reator constante, para isso pode-se aumentar a intensidade da fonte de nêutrons. Neste trabalho, esta compensação se dá através de um mecanismo de ajuste de subcriticalidade que utiliza o Método de Expansão Nodal (NEM), para resolver a

equação de difusão de nêutrons para o problema de autovalor, e obter o fator de multiplicação efetivo. Este mecanismo é utilizado todo o início de ciclo de queima através de ajustes em um parâmetro  $\alpha$ , que é função do  $k_{\text{eff}}$ .

Esta diminuição do fator de multiplicação é devido aos processos de fissão, captura neutrônica e decaimento radioativo que ocorrem ao longo da operação do reator, fazendo com que sejam produzidos actínides e produtos de fissão que alteram a composição isotópica inicial do combustível e, conseqüentemente, as propriedades do reator, como o fluxo de nêutrons e a densidade de potência (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976). Essa alteração da composição isotópica, tanto em função do tempo e do espaço, é determinada pelo cálculo de depleção isotópica. Esse cálculo possibilita determinar a melhor configuração do combustível no núcleo, levando em conta tanto a remoção de calor quanto fatores econômicos, e desempenha um importante papel no controle e segurança de um reator nuclear (GLASSTONE e SESONSKE, 1994).

A solução das equações de depleção isotópicas, ou seja, a obtenção das concentrações isotópicas no núcleo do reator é a tarefa que consome mais tempo de computação nos sistemas de cálculo que simulam o núcleo de reatores nucleares. Já que, a análise das mudanças na composição isotópica requer o conhecimento da distribuição espacial do fluxo de nêutrons ao longo do tempo, enquanto que a distribuição espacial do fluxo de nêutrons varia em função da composição do núcleo. Esta inter-relação, entre o fluxo de nêutrons e a composição isotópica, apresenta, assim, certa dificuldade na resolução das equações de depleção. Sendo assim, é de interesse que este tipo de cálculo seja feito da forma mais rápida possível, sem que haja perda na precisão dos resultados.

Nesta tese de doutorado, duas diferentes metodologias de cálculo são propostas para a obtenção do fluxo de nêutrons para a solução do problema de depleção isotópica em sistemas subcríticos guiados por fonte externa de nêutrons, em estrutura de malha grossa. O problema consiste na resolução das equações de depleção isotópicas, assim como a solução da equação para o fluxo de nêutrons.

A primeira metodologia, chamada de Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com DFMG, utiliza o método das Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG) para a solução da equação de difusão de nêutrons para problemas de fonte fixa. Os resultados obtidos por esta metodologia são usados como referência para a

verificação da precisão dos resultados obtidos com a Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com PHE, na qual utiliza o método de Expansão em Pseudo-Harmônicos (PHE). Ambas as metodologias são usadas para calcular o fluxo de nêutrons no início de cada intervalo de queima e, assim, calcular as concentrações isotópicas através das equações de depleção isotópicas.

A partir dos resultados obtidos pelas metodologias de cálculo de depleção desenvolvidas, dois sistemas subcríticos acionados por fonte externa de nêutrons são utilizados para demonstrar a aplicabilidade das mesmas. Também, dois testes são realizados em ambas as configurações, onde em um deles considerou-se a intensidade da fonte externa de nêutrons fixa ao longo do tempo e o outro a potência de operação do sistema foi mantida fixa ao longo do tempo.

Além da comparação entre os desvios de ambas as metodologias, relativos às concentrações isotópicas ao longo dos ciclos de queima do reator, avaliou-se o comportamento do fator de multiplicação efetivo ao longo do tempo, o comportamento da potência de operação do sistema para a intensidade da fonte externa de nêutrons fixa, o comportamento da intensidade da fonte externa de nêutrons para a potência de operação do sistema de fonte fixa, a distribuição de potência do núcleo e comparou-se o custo computacional de ambas as metodologias.

No início de 2022, as metodologias propostas neste trabalho, assim como os resultados aqui apresentados, deram origem a um artigo aceito e publicado na *Annals of Nuclear Energy* (BELO e SILVA, 2022). O processo de revisão do mesmo trouxe importantes conceitos que anteriormente não haviam sido investigados e que agora estão presentes nesta tese.

## **1.1 Divisão do Trabalho**

Esta tese de doutorado foi organizada em sete capítulos. No capítulo 2, o problema de depleção isotópica em um sistema subcrítico guiado por uma fonte externa de nêutrons é descrito, através das equações de depleção isotópicas, para os actínídeos e para os produtos de fissão, e da equação de difusão de nêutrons, utilizada para o cálculo

do fluxo de nêutrons. Também, é abordado o tratamento da fonte externa de nêutrons, através da relação entre a intensidade da fonte e a potência do sistema.

No capítulo 3, o mecanismo de ajuste de subcriticalidade é descrito, onde a equação de difusão de nêutrons para o problema de autovalor é resolvida numericamente através da discretização das variáveis espaciais da equação pelo Método de Expansão Nodal (NEM).

O capítulo 4 apresenta a Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com DFMG, onde a equação de difusão de nêutrons para o problema de fonte fixa é resolvida numericamente através da discretização das variáveis espaciais da equação pelo método das Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG). Enquanto que no capítulo 5, a Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com PHE é apresentada para a obtenção das concentrações isotópicas. Para tal, a expansão do fluxo de nêutrons em pseudo-harmônicos, discretizado em malha grossa, é obtida utilizando o método Expansão em Pseudo-Harmônicos (PHE).

No capítulo 6 são descritos os dois sistemas subcríticos acionados por uma fonte externa de nêutrons que são utilizados para demonstrar a aplicabilidade de ambas metodologias, assim como, são apresentados os resultados numéricos obtidos pelas metodologias de cálculo de depleção desenvolvidas nos Capítulos 4 e 5.

Finalmente, as conclusões são apresentadas no capítulo 7.

# 2 Problema de Depleção Isotópica

## 2.1 Introdução

Durante os ciclos de operação de um reator nuclear, a composição do combustível está em constante mudança, devido às reações nucleares que ocorrem ao longo do processo de queima do combustível. Neste processo, reações de fissão nuclear, captura neutrônica e decaimento radioativo alteram as concentrações isotópicas dos núclídeos presentes na composição do combustível, causando transmutações nestes núclídeos e produzindo elementos transurânicos da série dos actínídeos da tabela periódica, bem como os produtos de fissão (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976).

Alguns produtos de fissão (PF) são caracterizados por altas seções de choque microscópicas de absorção, o que pode afetar de maneira significativa a densidade populacional de nêutrons no núcleo do reator e, conseqüentemente a sua reatividade. O que em sistemas subcríticos guiados por fonte externa de nêutrons se faz muito importante, visto que a fonte externa de nêutrons mantém o reator em estado estacionário e sua intensidade deve ser ajustada a fim de controlar o sistema, frente às variações de reatividade que ocorrem ao longo da queima.

Cálculos de depleção são importantes para prever as mudanças nas concentrações isotópicas e nas propriedades gerais do reator, visto que as mesmas alteram grandezas, como o fluxo de nêutrons e a distribuição de potência no reator, além da reatividade. Ainda, o cálculo de depleção possibilita determinar a melhor configuração do combustível no núcleo do reator, levando em conta tanto a remoção de calor quanto fatores econômicos.

Para poder analisar os efeitos da depleção, ao longo do funcionamento do reator, é necessário identificar as concentrações isotópicas para diversos instantes (arbitrários) de tempo, ou seja, é preciso resolver as equações de depleção isotópicas. Essas equações descrevem o comportamento temporal das concentrações isotópicas dos núclídeos que compõem o combustível, dos produtos de fissão e dos actínídeos, presentes no núcleo do reator (LAMARSH, 1966).



O problema de depleção isotópica compreende na resolução das equações de depleção isotópicas, assim como a solução da equação para o fluxo de nêutrons. Porém, tal problema é não-linear, uma vez que, para se obterem as concentrações isotópicas, é necessário conhecer a distribuição do fluxo de nêutrons, ao passo que para se obter o fluxo de nêutrons é necessário conhecer as concentrações isotópicas (GLASSTONE e SESONSKE, 1994). Essas condições fazem com que o cálculo se torne computacionalmente custoso, pois, além do conhecimento das seções de choque microscópicas de todos os produtos de fissão e actínídeos, assim como, suas constantes de decaimento e as concentrações isotópicas iniciais, um excessivo tempo computacional é requerido na solução das equações de depleção isotópica e para o fluxo de nêutrons, simultaneamente. Sendo assim, é de interesse que este tipo de cálculo seja feito da forma mais rápida possível, sem que haja perda na precisão dos resultados.

O problema da não-linearidade pode ser contornado usando a chamada Aproximação Quase-Estática (STACEY, 2007, DULLA *et al.*, 2008). Embora as concentrações isotópicas variem exponencialmente no tempo, a forma espacial do fluxo de nêutrons varia lentamente com o tempo. Sendo assim, ao invés de resolver a equação para o fluxo de nêutrons simultaneamente com as equações de depleção isotópicas, ambas as equações são resolvidas separadamente. Nesta aproximação, o ciclo de queima (ou período de queima)  $[t_1, t_{L+1}]$  é dividido em  $\ell$  instantes de tempo, chamado de intervalos de queima  $[t_\ell, t_{\ell+1})$ , conforme é ilustrado na Figura 2.1.

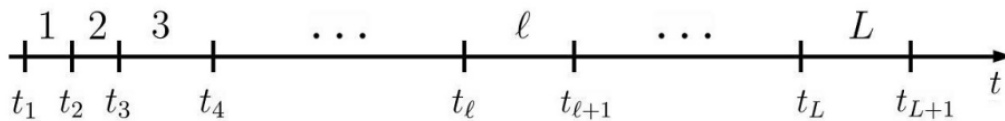


Figura 2.1: Discretização temporal do ciclo de operação do reator.

Em cada um desses intervalos de tempo, a distribuição do fluxo de nêutrons é considerada constante e igual àquela calculada no início do intervalo, ou seja, considerando o fluxo de nêutrons discretizado em grupos de energia tem-se, para qualquer instante  $t$ , a seguinte relação:

$$\phi_g(\vec{r}, t) \cong \phi_g(\vec{r}, t_\ell) \quad ; \quad \text{para } t \in [t_\ell, t_{\ell+1}) \quad . \quad (2.1)$$

A distribuição do fluxo de nêutrons, em um instante  $t_\ell$  qualquer,  $\phi_g(\vec{r}, t_\ell)$ , para  $\ell = 1, 2, \dots, L$  e  $g = 1, 2, \dots, G$ , onde  $G$  é o número de grupos de energia, é obtida resolvendo-se a equação de difusão de nêutrons, multigrupo e no estado estacionário, com os parâmetros nucleares (coeficiente de difusão e seções de choque macroscópicas) do instante  $t_\ell$ . Assim, para analisar o núcleo de um reator, durante o seu período de queima, utiliza-se uma sequência de cálculos estacionários para obter o fluxo de nêutrons, intercalados com os cálculos das equações de depleção isotópicas dependentes do tempo, para determinar todas as concentrações isotópicas no núcleo do reator.

Neste capítulo, o problema de depleção isotópica em um sistema subcrítico guiado por uma fonte externa de nêutrons será abordado. Primeiramente, as equações de depleção isotópicas para os actínídeos e para os produtos de fissão são apresentadas. Em seguida, a equação de difusão de nêutrons, utilizada para o cálculo do fluxo de nêutrons, será mostrada e, por fim, será apresentado o tratamento da fonte externa de nêutrons, a qual exerce um importante papel no controle do sistema.

## 2.2 Equação de Depleção Isotópica

As equações de depleção isotópica formam um sistema de equações diferenciais ordinárias lineares de primeira ordem e descrevem as taxas de mudanças nas concentrações isotópicas, sendo essas dependentes do combustível particular utilizado no núcleo do reator. O comportamento da variação das concentrações isotópicas é diretamente proporcional ao fluxo de nêutrons médio e das seções de choque microscópicas. Essas concentrações podem ser calculadas a partir de uma equação de balanço que correlaciona à produção e o consumo de cada nuclídeo presente na cadeia de depleção em análise.

Considerando o núcleo do reator heterogêneo, qualquer, dividido em um número finito de regiões espaciais homogêneas  $n$ , que possuem um volume arbitrário  $V_n$ , equivalente a um elemento combustível, nas quais a concentração isotópica de cada

nuclídeo,  $N_i(\vec{r}, t_\ell)$ , é tomada como um valor médio na região de interesse. Assim, pode se escrever:

$$N_i(\vec{r}, t_\ell) = N_i^n(t_\ell) \quad ; \quad \text{para todo } \vec{r} \in V_n \quad , \quad (2.2)$$

então

$$\frac{1}{V_n} \int_{V_n} N_i(\vec{r}, t_\ell) d^3r = N_i^n(t_\ell) \quad . \quad (2.3)$$

Uma vez adotada a Aproximação Quase-Estática para o fluxo médio de nêutrons na região homogênea  $n$  do núcleo do reator, o sistema de equações de depleção isotópica, que relaciona os actinídeos e os produtos de fissão, pode ser escrito em notação matricial, conforme (TAIPE *et al.*, 2020):

$$\frac{d}{dt} \underline{N}^n(t) = E_\ell^n \underline{N}^n(t) \quad ; \quad \text{para } t_\ell \leq t \leq t_{\ell+1} \quad \text{e } \ell = 1, \dots, L \quad , \quad (2.4)$$

onde  $\underline{N}^n(t)$  é o vetor das concentrações isotópicas e  $E_\ell^n$  é a matriz de evolução, assim definidos, respectivamente:

$$\underline{N}^n(t) \equiv \begin{bmatrix} N_1^n(t) \\ N_2^n(t) \\ \vdots \\ N_i^n(t) \\ \vdots \\ N_I^n(t) \end{bmatrix}$$

e

$$E_\ell^n \equiv \begin{bmatrix} e_{11}^n(t_\ell) & e_{12}^n(t_\ell) & \cdots & e_{1I}^n(t_\ell) \\ e_{21}^n(t_\ell) & e_{22}^n(t_\ell) & \cdots & e_{2I}^n(t_\ell) \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ e_{I1}^n(t_\ell) & e_{I2}^n(t_\ell) & \cdots & e_{II}^n(t_\ell) \end{bmatrix} \quad ,$$

sendo  $N_i^n(t)$  a concentração isotópica média do nuclídeo  $i$  na  $n$ -ésima região do núcleo do reator, em *átomos/barn·cm*, e  $I$  é o número total de nuclídeos na cadeia de depleção (actinídeos mais produtos de fissão).

Os elementos  $e_{ij}^n(t_\ell)$  da matriz de evolução  $E_\ell^n$ , em cada intervalo de tempo  $\ell$ , são dados, conforme:

i) Para os actinídeos ( $i = 1, \dots, I_A$ ):

$$e_{ij}^n(t_\ell) = \lambda_j \quad \text{ou} \quad 10^{-24} \sum_{g=1}^G \sigma_{c,g}^j \bar{\Phi}_g^n(t_\ell) ; \quad \text{para } j < i , \quad (2.5)$$

$$e_{ii}^n(t_\ell) = -[\lambda_i + 10^{-24} \sum_{g=1}^G \{\sigma_{a,g}^i + \sigma_{n2n,g}^i\} \bar{\Phi}_g^n(t_\ell)] \quad (2.6)$$

e

$$e_{ij}^n(t_\ell) = \lambda_j \quad \text{ou} \quad 10^{-24} \sum_{g=1}^G \sigma_{n2n,g}^j \bar{\Phi}_g^n(t_\ell) ; \quad \text{para } j > i , \quad (2.7)$$

onde  $I_A$  é o número total de actinídeos e  $\lambda_i$  representa a constante de decaimento  $\alpha$ ,  $\beta$  ou  $\gamma$ .

ii) Para os produtos de fissão ( $i = I_A + 1, \dots, I$ ):

$$e_{ij}^n(t_\ell) = 10^{-24} \gamma_{ij} \sum_{g=1}^G \sigma_{f,g}^j \bar{\Phi}_g^n(t_\ell) ; \quad \text{para } j = 1, \dots, I_A , \quad (2.8)$$

$$e_{ii}^n(t_\ell) = -[\lambda_i + 10^{-24} \sum_{g=1}^G \sigma_{c,g}^i \bar{\Phi}_g^n(t_\ell)] \quad (2.9)$$

e

$$e_{ij}^n(t_\ell) = \lambda_j ; \quad \text{para } j = i - 1 , \quad (2.10)$$

onde  $\sigma_{c,g}^i$ ,  $\sigma_{a,g}^i$ ,  $\sigma_{f,g}^i$  e  $\sigma_{n2n,g}^i$  são as seções de choque microscópicas de captura, absorção, fissão e da reação  $n2n$ , em *barn*, do nuclídeo  $i$  para o grupo  $g$  de energia, com  $g = 1, \dots, G$ , respectivamente,  $\gamma_{ij}$  representa a fração percentual da fissão de um

actínídeo  $j$  para produzir o produto de fissão  $i$  e  $\bar{\phi}_g^n(t_\ell)$  é o fluxo médio de nêutrons na  $n$ -ésima região do núcleo do reator, definido como:

$$\bar{\phi}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \phi_g(\vec{r}, t_\ell) dV , \quad (2.11)$$

onde  $\phi_g(\vec{r}, t_\ell)$  é a solução da equação de difusão de nêutrons para um reator subcrítico com uma fonte externa de nêutrons, conforme será abordado na Seção 2.3.

Neste trabalho, o método escolhido para a solução da Equação (2.4) foi proposto por ALVIM *et al.* (2010), na qual utiliza o chamado Método de Colocação Polinomial de Jacobi para determinar a exponencial da matriz de depleção, ou seja,

$$\underline{N}^n(t_{\ell+1}) = e^{E_\ell^n \Delta t_\ell} \underline{N}^n(t_\ell) , \quad (2.12)$$

onde  $\Delta t_\ell = t_{\ell+1} - t_\ell$ . O cálculo da matriz  $e^{E_\ell^n \Delta t_\ell}$  é feito através do método de matriz de transição. O procedimento completo, com maiores detalhes é descrito em HEIMLICH *et al.* (2016). Este método faz parte do Código Nacional de Física de Reatores (CNFR) (SILVA *et al.*, 2010, PRATA *et al.*, 2013, HEIMLICH *et al.*, 2016, 2018). No entanto, é importante ressaltar que qualquer outro método poderia ser usado para resolver a Equação (2.4), visto que o mesmo não tem influência nas metodologias de cálculo que são apresentadas neste trabalho.

## 2.3 Equação para o Fluxo de Nêutrons

Conforme observado, a análise de depleção isotópica do combustível envolve uma variedade de processos nucleares que influenciam diretamente o fluxo de nêutrons e, conseqüentemente, a distribuição dos nêutrons dentro do reator. O conhecimento da distribuição dos nêutrons possibilita determinar a taxa na qual variam as reações nucleares que ocorrem ao longo do ciclo de operação do reator. Em análise de reatores nucleares, diversas técnicas são utilizadas para modelar a distribuição dos nêutrons no sistema e é fato conhecido que aproximações de baixa ordem são normalmente

empregadas para a modelagem do fenômeno de transporte de nêutrons, como a teoria da difusão de nêutrons (DUDERSTADT e HAMILTON, 1976).

A equação de difusão de nêutrons é uma equação diferencial parcial que modela a variação de densidade de nêutrons e representa o balanço entre produção e perda de nêutrons. A equação de difusão de nêutrons para um reator subcrítico com uma fonte externa de nêutrons, na formulação de multigrupos de energia, é escrita da seguinte forma:

$$-\vec{\nabla} \cdot \left( D_g(\vec{r}, t_\ell) \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, t_\ell) \right) + \Sigma_{Rg}(\vec{r}, t_\ell) \phi_g(\vec{r}, t_\ell) = \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(\vec{r}, t_\ell) \phi_{g'}(\vec{r}, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{gg'}(\vec{r}, t_\ell) \phi_{g'}(\vec{r}, t_\ell) + s_{ext,g}(\vec{r}, t_\ell) , \quad (2.13)$$

onde  $s_{ext,g}(\vec{r}, t_\ell)$  é a fonte externa de nêutrons do grupo  $g$  e no instante  $t_\ell$ , e  $\chi_g$  é o espectro de fissão de nêutrons do grupo  $g$  e  $\phi_g(\vec{r}, t_\ell)$  é o fluxo de nêutrons do grupo  $g$  e no instante  $t_\ell$ . O coeficiente de difusão do grupo  $g$  é definido por:

$$D_g(\vec{r}, t_\ell) \equiv \frac{1}{3\Sigma_{trg}(\vec{r}, t_\ell)} \quad (2.14)$$

e a seção de choque macroscópica de remoção para nêutrons do grupo  $g$  é definida como:

$$\Sigma_{Rg}(\vec{r}, t_\ell) \equiv \Sigma_{cg}(\vec{r}, t_\ell) + \Sigma_{fg}(\vec{r}, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{g'g}(\vec{r}, t_\ell) . \quad (2.15)$$

As seções de choque macroscópicas de transporte, fissão, captura, espalhamento e o produto do número médio de nêutrons emitidos na fissão pela seção de choque macroscópica de fissão são escritas, para  $\vec{r} \in V_n$ , respectivamente, como:

$$\Sigma_{trg}(\vec{r}, t_\ell) = \sum_{i=1}^I N_i^n(t_\ell) \sigma_{tr,g}^i + \Sigma_{trg}^{STRM,n} , \quad (2.16)$$

$$\Sigma_{fg}(\vec{r}, t_\ell) = \sum_{i=1}^{I_A} N_i^n(t_\ell) \sigma_{f,g}^i, \quad (2.17)$$

$$\Sigma_{cg}(\vec{r}, t_\ell) = \sum_{i=1}^I N_i^n(t_\ell) \sigma_{c,g}^i + \Sigma_{cg}^{STRM,n} + \alpha(t_\ell) \Sigma_{cg}^{ABS,n}, \quad (2.18)$$

$$\Sigma_{gg'}(\vec{r}, t_\ell) = \sum_{i=1}^I N_i^n(t_\ell) \sigma_{s,i}^{g' \rightarrow g} + \Sigma_{gg'}^{STRM,n} + \alpha(t_\ell) \Sigma_{gg'}^{ABS,n} \quad (2.19)$$

e

$$v\Sigma_{fg}(\vec{r}, t_\ell) = \sum_{i=1}^{I_A} N_i^n(t_\ell) v\sigma_{f,g}^i, \quad (2.20)$$

onde  $\sigma_{s,i}^{g' \rightarrow g}$  é a seção de choque microscópica do nuclídeo  $i$ , em *barn*, representando o espalhamento do grupo  $g'$  para o grupo  $g$ ,  $\Sigma_{trg}^{STRM,n}$ ,  $\Sigma_{cg}^{STRM,n}$  e  $\Sigma_{gg'}^{STRM,n}$  são, respectivamente, as seções macroscópicas de transporte e captura do grupo  $g$ , e a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo  $g'$  para o grupo  $g$  do material estrutural presente na  $n$ -ésima região do reator.

O parâmetro  $\alpha(t_\ell)$ , presente nas Equações (2.18) e (2.19), é usado para ajustar a subcriticalidade do sistema, enquanto que  $\Sigma_{cg}^{ABS,n}$  e  $\Sigma_{gg'}^{ABS,n}$  são, respectivamente, a seção de choque macroscópica de captura do grupo  $g$  e a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo  $g'$  para o grupo  $g$  do material absorvedor presente na  $n$ -ésima região do reator, utilizado no mecanismo de ajuste de subcriticalidade que será abordado no Capítulo 3.

## 2.4 Tratamento da Fonte Externa de Nêutrons

Em reatores subcríticos acionados por fonte externa de nêutrons, a fonte externa tem um importante papel no controle do sistema. Além da sua intensidade estar

relacionada à potência operacional do sistema, ela também determina a magnitude do fluxo de nêutrons.

Considerando que  $I_s(t_\ell)$ , em *nêutrons/s*, é a intensidade da fonte externa de nêutrons, segue-se que

$$\sum_{g=1}^G \int_V s_{ext,g}(\vec{r}, t_\ell) dV = I_s(t_\ell) \quad , \quad (2.21)$$

onde  $V$  é o volume do sistema. No entanto, a fonte externa de nêutrons está localizada e ocupa um volume  $V_s$  no núcleo do reator, de modo que pode ser escrito da seguinte forma:

$$s_{ext,g}(\vec{r}, t_\ell) = \bar{I}_s(t_\ell) S_g(\vec{r}) \quad , \quad (2.22)$$

com

$$\bar{I}_s(t_\ell) \equiv I_s(t_\ell)/V_s \quad (2.23)$$

e

$$S_g(\vec{r}) = \begin{cases} \xi_g & ; \text{ para } \vec{r} \in V_s \\ 0 & ; \text{ para } \vec{r} \notin V_s \end{cases} \quad , \quad (2.24)$$

onde  $\xi_g$  é o espectro de energia dos nêutrons emitidos pela fonte externa de nêutrons, de tal forma que

$$\sum_{g=1}^G \xi_g = 1 \quad . \quad (2.25)$$



Usando a Equação (2.22) na Equação (2.13), obtém-se:

$$-\vec{\nabla} \cdot \left( D_g(\vec{r}, t_\ell) \vec{\nabla} \hat{\Phi}_g(\vec{r}, t_\ell) \right) + \Sigma_{Rg}(\vec{r}, t_\ell) \hat{\Phi}_g(\vec{r}, t_\ell) = \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{\Sigma_{fg'}}(\vec{r}, t_\ell) \hat{\Phi}_{g'}(\vec{r}, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{gg'}(\vec{r}, t_\ell) \hat{\Phi}_{g'}(\vec{r}, t_\ell) + S_g(\vec{r}) \quad , \quad (2.26)$$

onde

$$\hat{\Phi}_g(\vec{r}, t_\ell) \equiv \phi_g(\vec{r}, t_\ell) / \bar{I}_s(t_\ell) \quad . \quad (2.27)$$

Considerando a Equação (2.11) e usando a Equação (2.27), tem-se que:

$$\bar{\phi}_g^n(t_\ell) = \bar{I}_s(t_\ell) \hat{\Phi}_g^n(t_\ell) \quad , \quad (2.28)$$

com

$$\hat{\Phi}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \hat{\Phi}_g(\vec{r}, t_\ell) dV \quad . \quad (2.29)$$

Entretanto, a potência do sistema, no instante  $t_\ell$ , é dada por:

$$P(t_\ell) = \sum_{g=1}^G \int_V \omega_{\Sigma_{fg}}(\vec{r}, t_\ell) \phi_g(\vec{r}, t_\ell) dV \quad , \quad (2.30)$$

com

$$\omega_{\Sigma_{fg}}(\vec{r}, t_\ell) = \sum_{i=1}^{I_A} \omega_g^i N_i^n(t_\ell) \sigma_{f,g}^i \equiv \omega_{\Sigma_{fg}}^n(t_\ell) \quad . \quad (2.31)$$

Então, considerando as Equações (2.11), (2.30) e (2.31), pode-se escrever:

$$\hat{P}(t_\ell) = \sum_{g=1}^G \sum_{n=1}^N \omega_{\Sigma_{fg}}^n(t_\ell) \bar{\phi}_g^n(t_\ell) V_n \quad . \quad (2.32)$$

Substituindo a Equação (2.28) na Equação (2.32), obtém-se a potência operacional do sistema, conforme:

$$P(t_\ell) = \bar{I}_s(t_\ell) \sum_{g=1}^G \sum_{n=1}^N \omega \Sigma_{fg}^n(t_\ell) \hat{\Phi}_g^n(t_\ell) V_n . \quad (2.33)$$

A partir da Equação (2.33), tem-se que a potência de operação do sistema pode ser obtida diretamente, uma vez conhecida a intensidade da fonte externa de nêutrons. Porém, também é possível, a partir da mesma equação, obter a intensidade da fonte externa de nêutrons se a potência operacional do sistema for conhecida. Mas deve-se notar que a equação que descreve a forma espacial do fluxo de nêutrons, em qualquer momento  $t_\ell$ , agora é dada pela Equação (2.26).

# 3 Ajuste de Subcriticalidade

## 3.1 Introdução

Conforme dito anteriormente, um reator do tipo ADS opera em um estado subcrítico, frequentemente com valores do fator de multiplicação efetivo,  $k_{\text{eff}}$ , entre 0,95 e 0,98, por razões de eficiência, segurança e licenciamento. Sabe-se que para manter o fluxo de nêutrons em estado estacionário no sistema subcrítico é necessário o uso de uma fonte externa de nêutrons, pois os nêutrons provenientes da fissão não são suficientes para manter a reação em cadeia autossustentável. A fonte externa de nêutrons torna-se assim uma parte essencial do sistema.

Assim, a intensidade da fonte externa de nêutrons deve ser ajustada de acordo com as mudanças que ocorrem no  $k_{\text{eff}}$  ao longo do ciclo de operação do reator, para manter o desejado nível de subcriticalidade do sistema (TSUJIMOTO *et al.*, 2012). Neste trabalho, esse ajuste é realizado através do parâmetro  $\alpha(t_\ell)$  que aparece nas Equações (2.18) e (2.19). Portanto, o procedimento adotado consiste em solucionar o seguinte problema de autovalor:

$$-\vec{\nabla} \cdot \left( D_g(\vec{r}, t_\ell) \vec{\nabla} \varphi_g(\vec{r}, t_\ell) \right) + \Sigma_{Rg}(\vec{r}, t_\ell) \varphi_g(\vec{r}, t_\ell) = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(\vec{r}, t_\ell) \varphi_{g'}(\vec{r}, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{gg'}(\vec{r}, t_\ell) \varphi_{g'}(\vec{r}, t_\ell) . \quad (3.1)$$

A solução numérica da equação de difusão de nêutrons para o problema de autovalor, apresentada na Equação (3.1), é realizada a partir da discretização das variáveis espaciais da equação através do Método de Expansão Nodal (NEM) (SILVA *et al.*, 2010, SILVA *et al.*, 2011), que será descrito neste capítulo. Também, será apresentado o mecanismo utilizado para ajustar a subcriticalidade do sistema.

## 3.2 Método da Expansão Nodal

O desenvolvimento de métodos nodais de malha grossa para resolver numericamente a equação de difusão de nêutrons multigrupo teve seu início na década de 70. Através da discretização do domínio espacial do núcleo do reator heterogêneo em regiões homogêneas, esses métodos são capazes de calcular o autovalor e o fluxo de nêutrons médio nessas regiões com grande precisão, assim como, a distribuição de potência no núcleo do reator, considerando essas regiões com o tamanho de um elemento combustível.

Entre os métodos nodais, o Método da Expansão Nodal (FINNEMANN *et al.*, 1977), utiliza a equação da difusão de nêutrons 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 dos nodos. O método NEM tem seu ponto de partida na equação da continuidade de nêutrons e na Lei de Fick.

A equação da continuidade de nêutrons em geometria cartesiana, estado estacionário, no instante  $t_\ell$ , e na formulação multigrupos de energia, é dada por:

$$\sum_{u=x,y,z} \frac{\partial}{\partial u} J_{gu}(x, y, z, t_\ell) + \Sigma_{Rg}(x, y, z, t_\ell) \varphi_g(x, y, z, t_\ell) = \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(x, y, z, t_\ell) \varphi_{g'}(x, y, z, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{gg'}(x, y, z, t_\ell) \varphi_{g'}(x, y, z, t_\ell), \quad (3.2)$$

com  $g = 1, G$ , onde  $J_{gu}(x, y, z, t_\ell)$  é a densidade de corrente líquida de nêutrons do grupo  $g$ , para a direção  $u$  ( $u = x, y, z$ ) e instante  $t_\ell$ .

O primeiro termo do lado esquerdo da Equação (3.2) representa a fuga de nêutrons, o segundo termo da mesma equação representa a remoção de nêutrons através da interação nêutron-núcleo. Os dois termos do lado direito da equação são os termos de fonte de fissão e de espalhamento, respectivamente.

Segundo a lei de Fick (LAMARSH, 1966) a densidade de corrente de nêutrons é diretamente proporcional ao gradiente do fluxo de nêutrons, onde a constante de proporcionalidade é o coeficiente de difusão, que depende do meio material. O sinal

negativo indica que a difusão ocorre da região de maior densidade para a de menor densidade de nêutrons.

Na Equação (3.2), a densidade de corrente líquida,  $J_{gu}(x, y, z, t_\ell)$ , e o fluxo de nêutrons,  $\varphi_g(x, y, z, t_\ell)$ , são desconhecidos, mas estão relacionados pela lei de Fick, que possui a seguinte forma aproximada:

$$J_{gu}(x, y, z, t_\ell) \cong -D_g(x, y, z, t_\ell) \frac{\partial}{\partial u} \varphi_g(x, y, z, t_\ell) . \quad (3.3)$$

Como o método NEM usa as correntes parciais (LAMARSH, 1966), ou seja, são componentes da corrente líquida de nêutrons, conforme:

$$J_{gu}(x, y, z, t_\ell) = J_{gu}^+(x, y, z, t_\ell) - J_{gu}^-(x, y, z, t_\ell) . \quad (3.4)$$

No NEM, o domínio espacial do núcleo do reator é dividido em paralelepípedos contíguos, chamados de nodos, cujas arestas podem ou não serem congruentes, conforme representado na Figura 3.1. Considerou-se que os nodos  $n$  tenham o mesmo volume arbitrário  $V_n$  (equivalente a um elemento combustível) nas quais o núcleo do reator heterogêneo foi dividido na Seção 2.2.

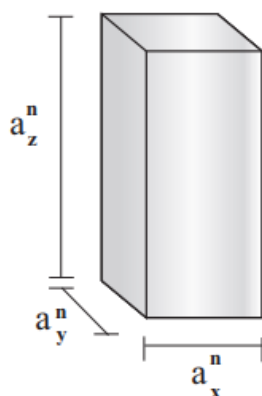


Figura 3.1 - Representação de um nodo  $n$  arbitrário e suas dimensões.

Assim, integrando a Equação (3.2) no volume  $V_n = a_x^n a_y^n a_z^n$  do nodo  $n$  e dividindo-a por este volume, tem-se a equação de balanço nodal, qual seja,

$$\begin{aligned}
& \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} [\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) - \bar{J}_{gul}^n(t_\ell)] + \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) \\
& = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \bar{\varphi}_{g'}^n(t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \bar{\varphi}_{g'}^n(t_\ell) \quad , \quad (3.5)
\end{aligned}$$

onde, por definição:

$$\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \varphi_g(x, y, z, t_\ell) dV \quad , \quad (3.6)$$

$$\bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_s^{g' \rightarrow g}(x, y, z, t_\ell) dV \quad (3.7)$$

e

$$\Sigma_x^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{xg}(x, y, z, t_\ell) dV \quad , \quad (3.8)$$

com  $\Sigma_{xg}$  representando  $\Sigma_{cg}$ ,  $\Sigma_{fg}$ ,  $\nu \Sigma_{fg}$  ou  $\Sigma_{g'g}$ . Além disso, as densidades de correntes líquidas médias na face  $s$  da direção  $u$  do nodo  $n$ , são assim definidas:

$$\bar{J}_{gus}^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} J_{gu}(u_s^n, v, w, t_\ell) dv dw \quad ; \quad u = x, y, z \quad e \quad s = r, l \quad , \quad (3.9)$$

com

$$u_s^n = \begin{cases} 0 & , \quad \text{para } s = l \text{ (face esquerda do nodo)} \\ a_u^n & , \quad \text{para } s = r \text{ (face direita do nodo)} \end{cases} \quad .$$

Observa-se da Equação (3.5) que há, para cada grupo de energia, uma equação e sete funções desconhecidas, seis referentes às densidades de corrente médias em cada face do nodo,  $\bar{J}_{gus}^n(t_\ell)$ , sendo  $u = x, y, z$  e  $s = l, r$ , e uma é o fluxo médio no nodo,  $\bar{\varphi}_g^n(t_\ell)$ .

### 3.2.1 Equações de Acoplamento Nodal

A relação existente entre as densidades de corrente médias nas faces do nodo e o fluxo médio no nodo, as chamadas equações de acoplamento nodal, são obtidas a partir da lei de Fick, substituindo a Equação (3.3) na Equação (3.9), o que resulta na seguinte equação:

$$\bar{J}_{gus}^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} -D_g(u_s^n, v, w, t_\ell) \frac{\partial}{\partial u} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) \Big|_{u=u_s^n} dv dw. \quad (3.10)$$

Como os parâmetros nucleares são uniformes dentro do nodo, da Equação (3.10) obtém-se:

$$\bar{J}_{gus}^n(t_\ell) = -\bar{D}_g^n(t_\ell) \frac{d}{du} \left( \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \frac{\partial}{\partial u} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) dv dw \right) \Big|_{u=u_s^n} \quad (3.11)$$

ou

$$\bar{J}_{gus}^n(t_\ell) = -\bar{D}_g^n(t_\ell) \frac{d}{du} \bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \Big|_{u=u_s^n}, \quad (3.12)$$

onde  $\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell)$  é o fluxo médio de nêutrons na área  $A_u^n = a_v^n a_w^n$ , transversal a direção  $u$  do nodo  $n$ , conforme apresentado na Figura 3.2, dado por:

$$\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) dv dw. \quad (3.13)$$

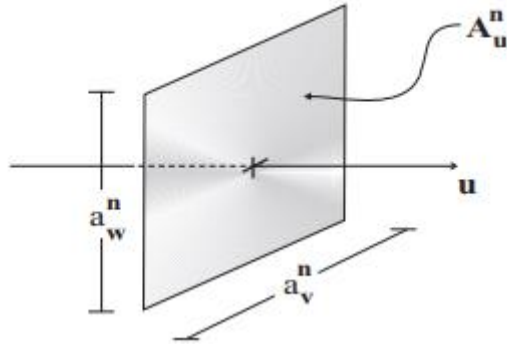


Figura 3.2 - Área transversal à direção  $u$ .

Esta nova função  $\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell)$  é solução da equação de difusão de nêutrons integrada transversalmente. Para tal, aplicando o operador de média em área, dado por:

$$\frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} (\cdot) dv dw, \quad (3.14)$$

na equação de difusão de nêutrons, Equação (3.5), e considerando os parâmetros nucleares uniformes dentro de cada nodo, obtém-se a equação de difusão de nêutrons integrada transversalmente à direção  $u$ ,

$$\begin{aligned} & -\bar{D}_g^n(t_\ell) \frac{d^2}{du^2} \bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) + \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) \bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \\ & = \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \bar{\Psi}_{g'ru}^n(u, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \bar{\Psi}_{g'ru}^n(u, t_\ell) - L_{gu}^n(u, t_\ell), \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde  $L_{gu}^n(u, t_\ell)$  é a fuga transversal à direção  $u$ , definida pela seguinte equação:

$$L_{gu}^n(u, t_\ell) \equiv \frac{-\bar{D}_g^n(t_\ell)}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \left( \frac{\partial^2}{\partial v^2} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \varphi_g(u, v, w, t_\ell) \right) dv dw. \quad (3.16)$$

No método NEM (SILVA *et al.*, 2010, SILVA *et al.*, 2011), a solução da Equação (3.15) é obtida através de uma expansão polinomial de quarta ordem no fluxo médio de nêutrons na face e uma expansão polinomial de segunda ordem no termo correspondente à fuga transversal, da seguinte forma:



$$\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) = \sum_{k=0}^4 c_{kgu}^n(t_\ell) h_k\left(\frac{u}{a_u^n}\right) \quad (3.17)$$

e

$$L_{gu}^n(u, t_\ell) = \sum_{k=0}^2 \alpha_{kgu}^n(t_\ell) h_k\left(\frac{u}{a_u^n}\right) , \quad (3.18)$$

onde  $\alpha_{kgu}^n(t_\ell)$  são os coeficientes do termo de fuga,  $c_{0gu}^n(t_\ell)$ ,  $c_{1gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{2gu}^n(t_\ell)$  são os coeficientes primários,  $c_{3gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{4gu}^n(t_\ell)$  são os coeficientes secundários. Os polinômios  $h_k(\xi)$ , que representam as funções bases do NEM (FINNEMANN *et al.*, 1977), para  $\xi \equiv u/a_u^n$ , são da seguinte forma:

$$h_0(\xi) = 1 , \quad (3.19)$$

$$h_1(\xi) = 2\xi - 1 , \quad (3.20)$$

$$h_2(\xi) = 6\xi(1 - \xi) - 1 , \quad (3.21)$$

$$h_3(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(2\xi - 1) \quad (3.22)$$

e

$$h_4(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(5\xi^2 - 5\xi + 1) . \quad (3.23)$$

Esses polinômios possuem as seguintes propriedades:

$$h_k(0) = h_k(1) = 0 ; \quad \forall k \geq 3 , \quad (3.24)$$

$$\int_0^1 h_k(\xi) d\xi = 0 ; \quad \forall k \geq 1 , \quad (3.25)$$

$$\int_0^1 h_1(\xi) h_k(\xi) d\xi = \begin{cases} 1/3, & \text{se } k = 1 \\ 0/3, & \text{se } k = 2 \\ 1/5, & \text{se } k = 3 \\ 0/3, & \text{se } k = 4 \end{cases} , \quad (3.26)$$

$$\int_0^1 h_2(\xi) h_k(\xi) d\xi = \begin{cases} 03/35, & \text{se } k = 1 \\ 1/5/5, & \text{se } k = 2 \\ 03/35, & \text{se } k = 3 \\ -3/35, & \text{se } k = 4 \end{cases} , \quad (3.27)$$

$$\int_0^1 h_1(\xi) \frac{d^2}{d\xi^2} h_k(\xi) d\xi = \begin{cases} -12, & \text{se } k = 3 \\ 0 \quad 3, & \text{se } k \neq 3 \end{cases} \quad (3.28)$$

e

$$\int_0^1 h_2(\xi) \frac{d^2}{d\xi^2} h_k(\xi) d\xi = \begin{cases} 12, & \text{se } k = 4 \\ 0 , & \text{se } k \neq 4 \end{cases} . \quad (3.29)$$

Nas próximas subseções, serão apresentados os processos utilizados para a obtenção dos coeficientes da expansão de quarta ordem do fluxo médio de nêutrons na face,  $\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell)$ , e da expansão em segunda ordem da fuga transversal,  $L_{gu}^n(u, t_\ell)$ , ou seja, os coeficientes  $c_{kgu}^n(t_\ell)$ , da Equação (3.17), e os coeficientes  $\alpha_{kgu}^n(t_\ell)$ , da Equação (3.18).

### 3.2.2 Coeficientes da Fuga Transversal

Os coeficientes da expansão que representam a fuga transversal,  $\alpha_{0gu}^n(t_\ell)$ ,  $\alpha_{1gu}^n(t_\ell)$  e  $\alpha_{2gu}^n(t_\ell)$ , utilizam as propriedades das funções de base  $h_k(\xi)$ . Para tais,

primeiramente utiliza-se a definição de valor médio da fuga transversal,  $\bar{L}_{gu}^n(t_\ell)$ , dado a partir de uma condição de consistência, onde

$$\bar{L}_{gu}^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} L_{gu}^n(u, t_\ell) du \quad , \quad (3.30)$$

com condições nas superfícies do nodo, quais sejam,

$$L_{gu}^n(u, t_\ell) = \sum_{k=0}^2 \alpha_{kgu}^n(t_\ell) h_k\left(\frac{u}{a_u^n}\right) \equiv L_{gus}^n(t_\ell) \quad . \quad (3.31)$$

Então, substituindo a Equação (3.18) na Equação (3.30) e fazendo uso da Equação (3.25), obtém-se que

$$\alpha_{0gu}^n(t_\ell) = \bar{L}_{gu}^n(t_\ell) \quad . \quad (3.32)$$

Agora, substituindo as funções de base, para os dois valores de  $u_s^n$ , na Equação (3.31) obtém-se um sistema de equações cuja solução resulta em

$$\alpha_{1gu}^n(t_\ell) = \frac{1}{2} \left( L_{gur}^n(t_\ell) - L_{gul}^n(t_\ell) \right) \quad (3.33)$$

e

$$\alpha_{2gu}^n(t_\ell) = \bar{L}_{gu}^n(t_\ell) - \frac{1}{2} \left( L_{gur}^n(t_\ell) + L_{gul}^n(t_\ell) \right) \quad . \quad (3.34)$$

Para o cálculo dos termos  $L_{gus}^n(t_\ell)$ , as seguintes condições de continuidade são impostas à função  $L_{gu}^n(u, t_\ell)$  e sua derivada, na interface entre dois nodos adjacentes (indicados por  $m$  e  $n$ ):

$$L_{gul}^n(t_\ell) = L_{gur}^m(t_\ell) \quad (3.35)$$

e

$$\frac{d}{du} L_{gu}^n(u, t_\ell) \Big|_{u=u_1^n} = \frac{d}{du} L_{gu}^m(u, t_\ell) \Big|_{u=u_1^n} . \quad (3.36)$$

Segundo o método NEM (FISCHER e FINNEMANN, 1981), as derivadas na Equação (3.36) podem ser aproximadas por diferenças finitas, resultando em:

$$\frac{\bar{L}_{gu}^n(t_\ell) - L_{gu}^n(t_\ell)}{a_u^n/2} = \frac{L_{gur}^m(t_\ell) - \bar{L}_{gu}^m(t_\ell)}{a_u^m/2} . \quad (3.37)$$

Então, com uso da Equação (3.35) na Equação (3.37), obtém-se que

$$L_{gur}^m(t_\ell) = \frac{a_u^n \bar{L}_{gu}^m(t_\ell) + a_u^m \bar{L}_{gu}^n(t_\ell)}{a_u^n + a_u^m} . \quad (3.38)$$

Para o cálculo das fugas transversais médias,  $\bar{L}_{gu}^n(t_\ell)$ , primeiro substitui-se a Equação (3.16) na Equação (3.30), depois utiliza-se a Equação (3.12), e então fazendo o uso da definição das correntes parciais,  $\bar{J}_{gus}^{\pm n}(t_\ell)$ , dada pela Equação (3.4), resulta em

$$\bar{L}_{gu}^n(t_\ell) = \sum_{v=v,w} \frac{1}{a_v^n} \{ [\bar{J}_{gvr}^{+n}(t_\ell) - \bar{J}_{gvr}^{-n}(t_\ell)] - [\bar{J}_{gvl}^{+n}(t_\ell) - \bar{J}_{gvl}^{-n}(t_\ell)] \} . \quad (3.39)$$

Completando assim o cálculo de todas as incógnitas necessárias para determinar os três coeficientes  $\alpha_{0gu}^n(t_\ell)$ ,  $\alpha_{1gu}^n(t_\ell)$  e  $\alpha_{2gu}^n(t_\ell)$ , da Equação (3.18), que representa a expansão do termo de fuga transversal.

### 3.2.3 Coeficientes Primários

Usando as propriedades das funções de base  $h_k(\xi)$  em  $\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell)$  e impondo a condição de consistência, qual seja,

$$\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) \equiv \frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) du , \quad (3.40)$$

obtém-se que

$$c_{0gu}^n(t_\ell) = \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) . \quad (3.41)$$

Os coeficientes  $c_{1gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{2gu}^n(t_\ell)$  podem ser determinados em função das condições de contorno no nodo impostas na Equação (3.17),

$$\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) = \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) + \sum_{k=0}^2 c_{kgu}^n(t_\ell) h_k\left(\frac{u}{a_u^n}\right) , \quad (3.42)$$

tal que,

$$\bar{\Psi}_{gul}^n(t_\ell) \equiv \bar{\Psi}_{gu}^n(0, t_\ell) = \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) - c_{1gu}^n(t_\ell) - c_{2gu}^n(t_\ell) \quad (3.43)$$

e

$$\bar{\Psi}_{gur}^n(t_\ell) \equiv \bar{\Psi}_{gu}^n(a_u^n, t_\ell) = \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) + c_{1gu}^n(t_\ell) - c_{2gu}^n(t_\ell) . \quad (3.44)$$

Subtraindo a Equação (3.44) pela Equação (3.43), tem-se que

$$c_{1gu}^n(t_\ell) = \frac{1}{2} \left( \bar{\Psi}_{gur}^n(t_\ell) - \bar{\Psi}_{gul}^n(t_\ell) \right) . \quad (3.45)$$

Somando as Equações (3.43) e (3.44), vem

$$c_{2gu}^n(t_\ell) = \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) - \frac{1}{2} \left( \bar{\Psi}_{gur}^n(t_\ell) + \bar{\Psi}_{gul}^n(t_\ell) \right) . \quad (3.46)$$

Note-se que, a partir da aproximação da difusão, pode-se escrever o fluxo médio na face do nodo em função das correntes parciais, da seguinte maneira:

$$\bar{\Psi}_{gus}^n(t_\ell) \equiv \bar{\Psi}_{gus}^n(u_s^n, t_\ell) = 2 \left( \bar{J}_{gus}^{+n}(t_\ell) + \bar{J}_{gus}^{-n}(t_\ell) \right) , \quad (3.47)$$

onde  $u = x, y, z$  e  $s = l, r$ . Logo, as Equações (3.45) e (3.46) poderiam ser reescritas em função das correntes parciais,  $\bar{J}_{gus}^{\pm n}(t_\ell)$ .

Na próxima subseção serão apresentados os coeficientes secundários, ou de alta ordem,  $c_{3gu}^n$  e  $c_{4gu}^n$ , presentes na Equação (3.17).

### 3.2.4 Coeficientes Secundários

A determinação dos coeficientes secundários,  $c_{3gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{4gu}^n(t_\ell)$ , é realizada através da técnica de resíduos ponderados (FINNEMANN *et al.*, 1977) aplicada a equação de difusão de nêutrons integrada transversalmente, obtendo assim, a seguinte equação:

$$\int_0^{a_u^n} \omega_i \left( \frac{u}{a_u^n} \right) \left\{ -\bar{D}_g^n(t_\ell) \frac{d^2}{du^2} \bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) + \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) \bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell) \right. \\ \left. - \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \bar{\Psi}_{g'u}^n(u, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \bar{\Psi}_{g'u}^n(u, t_\ell) \right. \\ \left. + L_{gu}^n(u, t_\ell) \right\} du = 0 \quad , \quad (3.48)$$

onde, por uma questão de precisão e eficiência, as funções peso  $\omega_i(\xi)$  são escolhidas como sendo as funções bases do NEM, de grau um e grau dois,  $h_1(\xi)$  e  $h_2(\xi)$ , para o cálculo dos coeficientes  $c_{3gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{4gu}^n(t_\ell)$ , respectivamente.

Então, substituindo as Equações (3.17) e (3.18) na Equação (3.48), e utilizando as propriedades das funções de base, dadas pelas Equações (3.26), (3.27), (3.28) e (3.29) obtém-se os seguintes sistemas de equações a partir dos quais os coeficientes secundários são, respectivamente calculados:

$$\left\{ \frac{12\bar{D}_g^n(t_\ell)}{(a_u^n)^2} + \frac{1}{5} \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) \right\} c_{3gu}^n(t_\ell) - \frac{1}{5} \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \left\{ \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \right. \\ \left. + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right\} c_{3gu}^n(t_\ell) = \frac{1}{3} \alpha_{1gu}^n(t_\ell) - \frac{1}{3} \left\{ \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) c_{1gu}^n(t_\ell) \right. \\ \left. - \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \left\{ \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right\} c_{1gu}^n(t_\ell) \right\} \quad (3.49)$$

e

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{12\bar{D}_g^n(t_\ell)}{(a_u^n)^2} + \frac{3\Sigma_{Rg}^n(t_\ell)}{35} \right\} c_{4gu}^n(t_\ell) - \frac{3}{35} \sum_{\substack{g'=1 \\ g \neq g'}}^G \left\{ \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \right. \\
& \left. + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right\} c_{4gu}^n(t_\ell) = \frac{1}{5} \alpha_{2gu}^n(t_\ell) - \frac{1}{5} \left\{ \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) c_{2u}^n(t_\ell) \right. \\
& \left. - \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \left\{ \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) + \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \right\} c_{2gu}^n(t_\ell) \right\} . \tag{3.50}
\end{aligned}$$

### 3.2.5 Correntes Parciais de Saída

Tendo 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. Para tal, substituindo a expansão da função  $\bar{\Psi}_{gu}^n(u, t_\ell)$  na Equação (3.12) e reescrevendo em função da definição de correntes parciais, obtém-se as seguintes equações:

$$\bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) - \bar{J}_{gul}^{-n}(t_\ell) = -\bar{D}_g^n(t_\ell) \sum_{k=1}^4 c_{kgu}^n(t_\ell) \frac{d}{du} h_k \left( \frac{u}{a_u^n} \right) \Bigg|_{u=0} \tag{3.51}$$

e

$$\bar{J}_{gur}^{+n}(t_\ell) - \bar{J}_{gur}^{-n}(t_\ell) = -\bar{D}_g^n(t_\ell) \sum_{k=1}^4 c_{kgu}^n(t_\ell) \frac{d}{du} h_k \left( \frac{u}{a_u^n} \right) \Bigg|_{u=a_u^n} . \tag{3.52}$$

Fazendo uso das definições dos coeficientes primários e secundários e das funções de base, pode-se obter as correntes parciais de saída do nodo a partir de algumas manipulações algébricas, os seja,

$$\begin{aligned}
\bar{J}_{gul}^{-n}(t_\ell) &= A_{0gu}^n(t_\ell) \{ \bar{\Phi}_g^n(t_\ell) + c_{4gu}^n(t_\ell) \} + A_{1gu}^n(t_\ell) \bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) \\
&+ A_{2gu}^n(t_\ell) \bar{J}_{gur}^{-n}(t_\ell) - A_{3gu}^n(t_\ell) c_{3gu}^n(t_\ell) \tag{3.53}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \bar{J}_{gur}^{+n}(t_\ell) &= A_{0gu}^n(t_\ell)\{\bar{\Phi}_g^n(t_\ell) + c_{4gu}^n(t_\ell)\} + A_{2gu}^n(t_\ell)\bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) \\ &+ A_{1gu}^n(t_\ell)\bar{J}_{gur}^{-n}(t_\ell) - A_{3gu}^n(t_\ell)c_{3gu}^n(t_\ell) \quad , \end{aligned} \quad (3.54)$$

onde os coeficientes  $A_{kgu}^n(t_\ell)$  são assim definidos:

$$A_{0gu}^n(t_\ell) \equiv \frac{6(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)}{1 + 12(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)} \quad , \quad (3.55)$$

$$A_{1gu}^n(t_\ell) \equiv \frac{1 - 48(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)^2}{[1 + 12(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)][1 + 4(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)]} \quad , \quad (3.56)$$

$$A_{2gu}^n(t_\ell) \equiv \frac{-8(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)}{[1 + 12(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)][1 + 4(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)]} \quad (3.57)$$

e

$$A_{3gu}^n(t_\ell) \equiv \frac{6(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)}{1 + 4(\bar{D}_g^n(t_\ell)/a_u^n)} \quad . \quad (3.58)$$

### 3.2.6 Equação para o Fluxo Médio Nodal

Uma vez determinadas as correntes parciais médias nas faces do nodo, o fluxo médio nodal pode ser obtido através da equação de balanço nodal. Substituindo as Equações (3.53) e (3.54) na Equação (3.5), obtém-se o seguinte sistema de equações para o cálculo, através de um processo iterativo, dos fluxos de nêutrons nos nodos:

$$\begin{aligned} \left\{ \sum_{u=x,y,z} 2 \frac{A_{0gu}^n(t_\ell)}{a_u^n} + \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) \right\} \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) = \\ \frac{\chi_g}{k_{\text{eff}}} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \bar{\varphi}_{g'}^n(t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \bar{\varphi}_{g'}^n(t_\ell) \\ + \sum_{u=x,y,z} 2 \frac{A_{0gu}^n(t_\ell)}{a_u^n} \left( 2 \left( \bar{J}_{gur}^{-n}(t_\ell) + \bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) \right) - c_{4gu}^n(t_\ell) \right) \quad . \end{aligned} \quad (3.59)$$



As equações apresentadas neste capítulo constituem um conjunto de equações do qual o fluxo médio nodal,  $\bar{\varphi}_g^n(t_\ell)$ , pode ser determinado usando condições de contorno e de interface nos nodos. Nota-se que, pelo fato de o método NEM usar uma expansão polinomial para os fluxos nas faces do nodo,  $\bar{\Psi}_{gus}^n(u, t_\ell)$ , e por utilizar a equação de difusão integrada transversalmente, essa formulação gerou um conjunto de equações para os quais foram definidos os coeficientes primários,  $c_{0gu}^n(t_\ell)$ ,  $c_{1gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{2gu}^n(t_\ell)$ , e secundários,  $c_{3gu}^n(t_\ell)$  e  $c_{4gu}^n(t_\ell)$ , e também a fuga transversal,  $L_{gu}^n(u, t_\ell)$ . Usando a expansão do fluxo da face do nodo na Lei de Fick, as correntes parciais de saída do nodo,  $\bar{J}_{gur}^-n(t_\ell)$  e  $\bar{J}_{gul}^+n(t_\ell)$ , foram expressas por quantidades previamente conhecidas, as quais acopladas com a equação de difusão integrada no volume do nodo, resultam na equação de balanço nodal e através de um processo iterativo de cálculo determina-se os fluxos médios nos nodos e as correntes parciais médias nas faces dos nodos, para enfim obter a subcriticalidade do sistema (expressa pelo  $k_{\text{eff}}$ ).

Neste trabalho, um programa de cálculo em linguagem FORTRAN foi desenvolvido utilizando o esquema iterativo de cálculo desenvolvido no CNFR (SILVA *et al.*, 2010, PRATA *et al.*, 2013, HEIMLICH *et al.*, 2016, 2018), na qual faz uso de apenas duas varreduras na malha por iteração externa (uma para as linhas e a outra para as colunas, para cada camada axial na qual o núcleo do reator foi dividido), diferindo assim dos esquemas que fazem uso de iterações internas. Para cada nodo percorrido, calculam-se o fluxo médio nodal,  $\bar{\varphi}_g^n(t_\ell)$ , usando a Equação (3.59), e as correntes parciais de saída,  $\bar{J}_{gus}^\pm n(t_\ell)$ , a partir das Equações (3.53) e (3.54), para as direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ . O fluxograma de cálculo utilizado está apresentado na Figura 3.3.

Após o processo de varredura NEM, o fator de multiplicação efetivo,  $k_{\text{eff}}$ , é calculado aplicando o método de Potências (NAKAMURA, 1977). A convergência, tanto para o fator de multiplicação efetivo quanto para o fluxo médio nodal, é verificada, conforme apresentado na Figura 3.4, onde  $\varepsilon_k$  e  $\varepsilon_\varphi$  são parâmetros predeterminados referentes às tolerâncias para o fator de multiplicação efetivo e para o fluxo médio nodal, respectivamente.

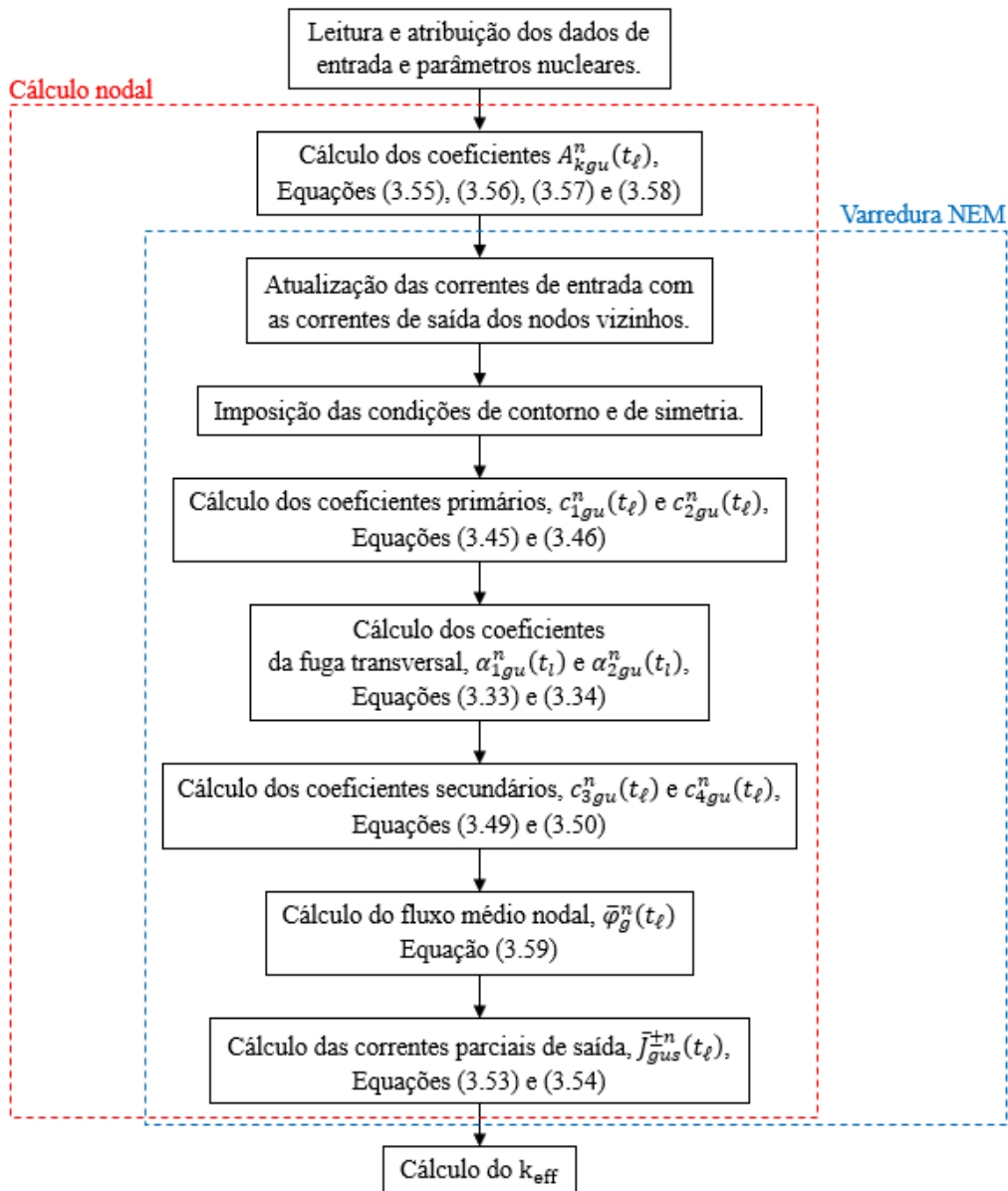


Figura 3.3: Sequência de cálculo nodal utilizando o NEM.

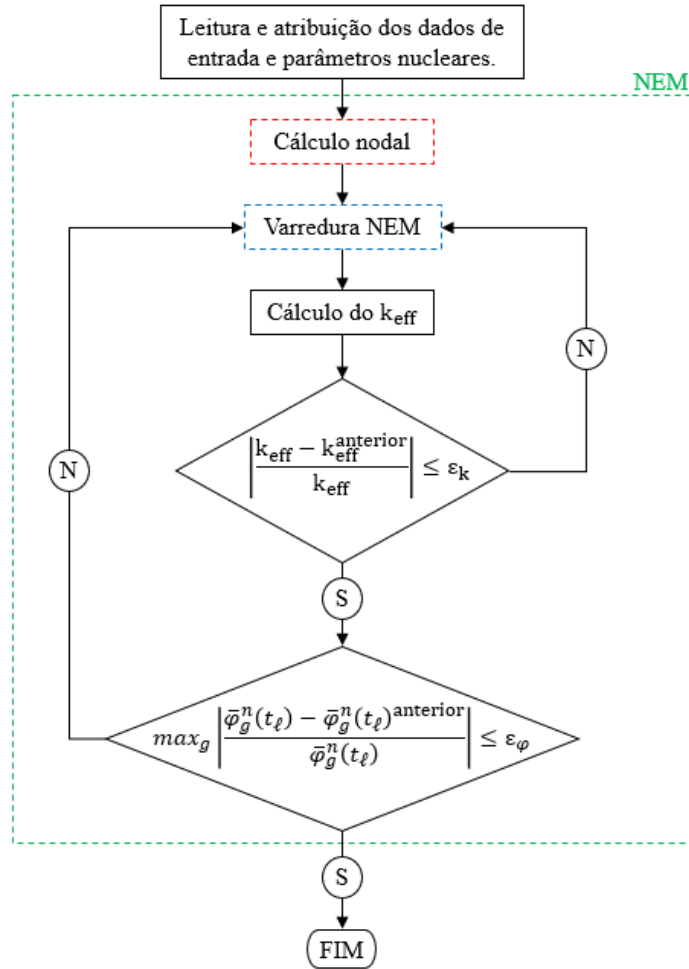


Figura 3.4: Sequência de cálculo para verificação de convergência.

### 3.3 Mecanismo de Ajuste de Subcriticalidade

Ao longo do ciclo de operação de reatores ADS, o sistema torna-se cada vez mais subcrítico, conforme os actínídeos e produtos de fissão são produzidos a partir da queima do combustível. Para manter o desejado nível de energia constante, durante todo o ciclo de operação do reator, a intensidade da fonte externa de nêutrons deve ser ajustada de acordo com as mudanças que ocorrem no  $k_{\text{eff}}$ . Como a intensidade da fonte externa de nêutrons é diretamente proporcional à corrente do feixe de prótons (ABDERRAHIM *et al.*, 2007), o aumento da intensidade da fonte pode implicar em uma corrente maior do que é atualmente disponível nos aceleradores de partícula (NISHIHARA *et al.*, 2008). Portanto, para evitar isto, é realizado um ajuste da

subcriticalidade do sistema (SUGAWARA *et al.*, 2016) para manter a intensidade da fonte externa de nêutrons e, conseqüentemente, a corrente do feixe de prótons dentro de limites viáveis.

O mecanismo de ajuste de subcriticalidade, desenvolvido neste trabalho, atuará em todo início de ciclo de queima, a partir de ajustes no parâmetro  $\alpha(t_\ell)$  que aparece nas Equações (2.18) e (2.19), através de um processo iterativo de cálculo. Neste mecanismo, assume-se que o parâmetro  $\alpha(t_\ell)$  é uma função linear de  $\Delta k \equiv k_{\text{eff}} - k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}(t_\ell)$ , onde  $k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}(t_\ell)$  é fator de multiplicação efetivo predefinido, conforme:

$$\alpha(t_\ell) = \frac{\alpha^{\text{atual}}(t_\ell)\Delta k^{\text{anterior}} - \alpha^{\text{anterior}}(t_\ell)\Delta k^{\text{atual}}}{\Delta k^{\text{anterior}} - \Delta k^{\text{atual}}} . \quad (3.60)$$

O parâmetro  $\alpha(t_\ell)$  simula o ajuste físico realizado no núcleo do reator para ajustar a subcriticalidade do sistema. Possibilidades incluiriam o uso de veneno queimável (integrado em elementos combustíveis ou como elementos separados dispostos ao redor do núcleo) (AIZAWA *et al.*, 2016), varetas de controle ou elementos preenchidos com hélio a baixa pressão (usando o coeficiente de vazio negativo do refrigerante de Pb-Bi) (HAECK *et al.*, 2006). Outro método seria o uso de envenenamento homogêneo do núcleo, preferencialmente que possa ser ajustado durante a operação, como ácido bórico em um reator PWR. Todos esses métodos são técnicas que podem ser usadas para manter o nível de reatividade global e, portanto, o fator de multiplicação do sistema o mais constante possível (HAECK *et al.*, 2006).

O processo é iniciado com dois cálculos de  $k_{\text{eff}}$ , o primeiro para  $\alpha(t_\ell) = 1,0$  (o primeiro  $\alpha^{\text{anterior}}(t_\ell)$ ) e o segundo para  $\alpha(t_\ell) = 0,5$  (o primeiro  $\alpha^{\text{atual}}(t_\ell)$ ), com os respectivos fatores de multiplicação efetivos (e os subsequentes) obtidos através da solução da equação de difusão de nêutrons pelo Método de Expansão Nodal (NEM), conforme descrito no Capítulo 3.2.

O processo iterativo termina quando o seguinte critério é atendido:

$$\left| \frac{k_{\text{eff}} - k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}(t_\ell)}{k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}(t_\ell)} \right| \leq \varepsilon_0 , \quad (3.61)$$

com  $\varepsilon_0$  conhecido, enquanto  $k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}(t_\ell)$  é dado por:

$$k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}(t_\ell) = \begin{cases} k_{\text{eff}}^{\text{inicial}}(t_\ell) & ; \text{ para } \ell = 1 \\ k_{\text{eff}}^{\text{inicial}}(t_\ell) - \Delta k_{\text{eff}} \frac{t_\ell}{t_{L+1}} & ; \text{ para } \ell = 2, \dots, L + 1 \end{cases}, \quad (3.62)$$

com  $k_{\text{eff}}^{\text{inicial}}$  e  $\Delta k_{\text{eff}}$ , apesar de conhecidos, dependem da configuração do sistema em análise (HAECK *et al.*, 2006, TSUJIMOTO *et al.*, 2004). O comportamento linear do  $k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}(t_\ell)$ , descrito na Equação (3.63) foi baseado na tendência observada no fator de multiplicação efetivo em função do ciclo de operação em reatores do tipo ADS, conforme apresentado em TSUJIMOTO *et al.* (2004) e SUGAWARA *et al.* (2016). Os parâmetros  $k_{\text{eff}}^{\text{inicial}}$  e  $\Delta k_{\text{eff}}$  são especificados nos respectivos núcleos apresentados no Capítulo 6.2.

O mecanismo de ajuste de subcriticalidade é apresentado em maiores detalhes na Figura 3.5. Este mecanismo é utilizado em ambas as metodologias de depleção que serão apresentadas nos Capítulos 4 e 5.

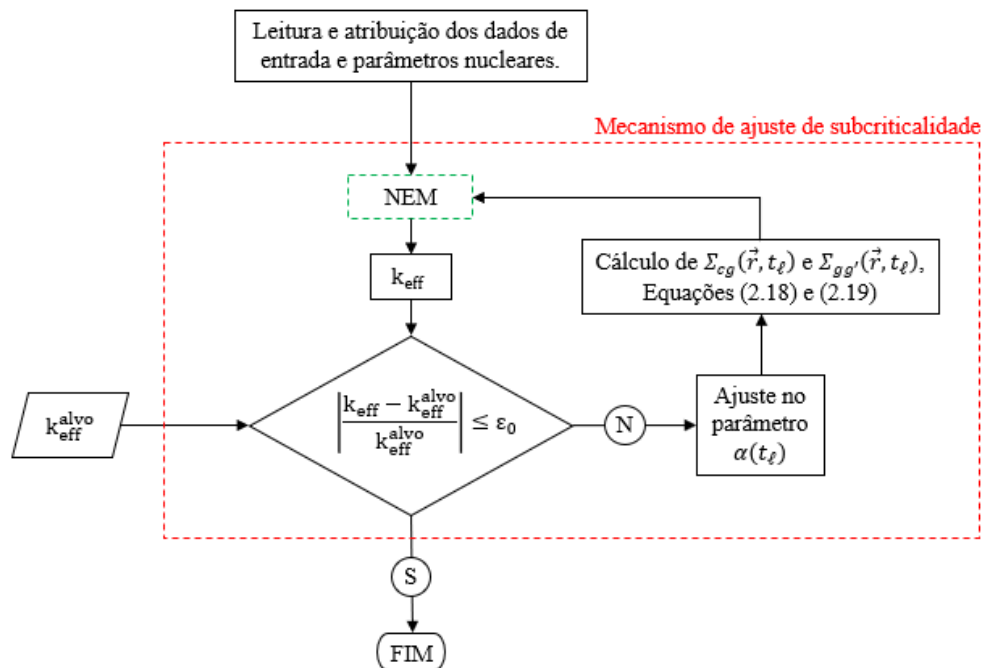


Figura 3.5: Sequência de cálculo do mecanismo de ajuste de subcriticalidade.

# 4 Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com DFMG

## 4.1 Introdução

Após a realização do ajuste da subcriticalidade do reator, dá-se início à metodologia de cálculo de depleção isotópica usando o método das Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG). Nesta metodologia, a solução numérica da equação de difusão de nêutrons para o problema de fonte fixa, apresentada na Equação (2.26), é realizada através do método DFMG (LIMA *et al.*, 2005) para a discretização das variáveis espaciais da equação.

Para tal, a equação da continuidade de nêutrons em geometria cartesiana, estado estacionário, no instante  $t_\ell$ , e na formulação multigrupos de energia, dada na Equação (3.2) é modificada para o problema de fonte fixa, conforme:

$$\begin{aligned} \sum_{u=x,y,z} \frac{\partial}{\partial u} J_{gu}(x, y, z, t_\ell) + \Sigma_{Rg}(x, y, z, t_\ell) \hat{\Phi}_g(x, y, z, t_\ell) = \\ \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(x, y, z, t_\ell) \hat{\Phi}_{g'}(x, y, z, t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{gg'}(x, y, z, t_\ell) \hat{\Phi}_{g'}(x, y, z, t_\ell) \\ + S_g(x, y, z) . \end{aligned} \quad (4.1)$$

De forma análoga, integrando a Equação (4.1) no volume  $V_n = a_x^n a_y^n a_z^n$  do nodo  $n$  e dividindo-a por este volume, tem-se a seguinte equação de balanço nodal modificada,

$$\begin{aligned} \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} [\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) - \bar{J}_{gul}^n(t_\ell)] + \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) \hat{\Phi}_g^n(t_\ell) \\ = \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \hat{\Phi}_{g'}^n(t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell) \hat{\Phi}_{g'}^n(t_\ell) + S_g^n , \end{aligned} \quad (4.2)$$

onde a fonte externa de nêutrons no nodo é definida por:

$$S_g^n \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} S_g(x, y, z) dV \quad . \quad (4.3)$$

A equação de balanço nodal, dada pela Equação (4.2), será utilizada neste capítulo para descrever a equação do fluxo médio no nodo,  $\widehat{\Phi}_g^n(t_\ell)$ , que é obtido diretamente através do DFMG. Na metodologia de cálculo de depleção isotópica, que será apresentada neste capítulo, o fluxo médio no nodo é utilizado para construção da matriz de evolução para o cálculo das concentrações isotópicas dos nuclídeos.

## 4.2 Método das Diferenças Finitas de Malha Grossa

O método de Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG) é um método que pode ser classificado como um método nodal, uma vez que este resolve a equação de difusão de nêutrons integrada no volume de um nodo considerado grande, como um elemento combustível, e assume como uniformes os parâmetros materiais pertencentes ao nodo. Também, pode ser considerado como um método de diferenças finitas, pois utiliza as correntes líquidas médias de nêutrons nas faces dos nodos de forma similar, em sua estrutura matemática, aos métodos de diferenças finitas clássicas. Este método obtém resultados bastante acurados se forem utilizados como ferramentas de aceleração de métodos nodais, como por exemplo o NEM e, também, são muito eficientes se forem utilizados sozinhos, tanto em relação à precisão dos resultados de cálculo quanto no tempo de execução dos mesmos.

O método DFMG, aqui apresentado, baseia-se na formulação proposta por ARAGONES e AHNERT (1986) e com aplicações nos trabalhos de PEREIRA *et al.*, (2002), SILVA e MARTINEZ (2003) e LIMA *et al.*, (2005).

A formulação deste método utiliza como dados de entrada alguns parâmetros nucleares médios no nodo  $n$ , como as seções de choque médias de remoção,  $\Sigma_{Rg}^n(t_\ell)$ , espalhamento,  $\bar{\Sigma}_{gg'}^n(t_\ell)$  e fissão,  $\nu\Sigma_{fg'}^n(t_\ell)$ , e o coeficiente médio de difusão,  $\bar{D}_g^n(t_\ell)$ , previamente calculados pelo NEM.

As correntes médias,  $\bar{J}_{gus}^n(t_\ell)$ , os fluxos médios nas faces,  $\bar{\Psi}_{gus}^n(t_\ell)$ , e o fluxo médio no nodo,  $\bar{\varphi}_g^n(t_\ell)$ , obtidos nos cálculos do NEM, são utilizados nos cálculos dos fatores de correção de malha grossa,  $f_{gus}^n(t_\ell)$ , no método DFMG (SILVA, 2011). Estes fatores são usados para corrigir as correntes líquidas nas interfaces do nodo, modificando assim a formulação clássica do método das Diferenças Finitas (malhas finas). É importante destacar que se os coeficientes de correção de malha grossa forem nulos, ou seja,  $f_{gus}^n(t_\ell) = 0$ , recai-se na metodologia clássica do método das Diferenças Finitas.

A partir da Figura 4.1, as correntes médias nas faces do nodo, para  $u = x, y, z$ , podem ser escritas da seguinte maneira:

$$\bar{J}_{gul}^n(t_\ell) = -D_{gul}^n(t_\ell)\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) + D_{gur}^m(t_\ell)\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) \quad , \quad (4.4)$$

para  $m = n_b, n_f, n_e$ , sendo os nodos abaixo, na frente e à esquerda, respectivamente e

$$\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) = -D_{gur}^n(t_\ell)\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) + D_{gul}^m(t_\ell)\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) \quad , \quad (4.5)$$

para  $m = n_d, n_t, n_c$ , sendo os nodos à direita, atrás e acima, respectivamente.

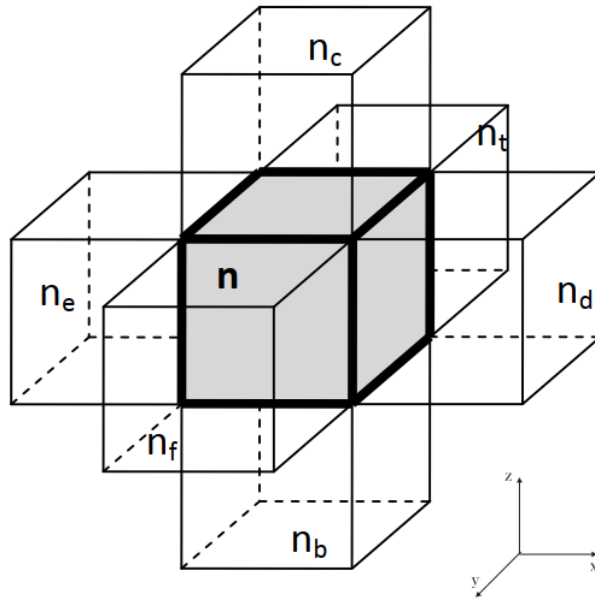


Figura 4.1: Representação de um nodo genérico  $n$  e seus nodos vizinhos.



Os coeficientes de difusão nas faces do nodo são assim calculados:

$$D_{gul}^n(t_\ell) \equiv \frac{2 \left( \frac{1}{a_u^m} D_g^m(t_\ell) + \frac{1}{2} f_{gur}^m(t_\ell) \right) \left( \frac{1}{a_u^n} D_g^n(t_\ell) - \frac{1}{2} f_{gul}^n(t_\ell) \right)}{\left( \frac{1}{a_u^m} D_g^m(t_\ell) + \frac{1}{2} f_{gur}^m(t_\ell) \right) + \left( \frac{1}{a_u^n} D_g^n(t_\ell) + \frac{1}{2} f_{gul}^n(t_\ell) \right)} \quad (4.6)$$

e

$$D_{gur}^n(t_\ell) \equiv \frac{2 \left( \frac{1}{a_u^n} D_g^n(t_\ell) - \frac{1}{2} f_{gur}^n(t_\ell) \right) \left( \frac{1}{a_u^m} D_g^m(t_\ell) + \frac{1}{2} f_{gul}^m(t_\ell) \right)}{\left( \frac{1}{a_u^n} D_g^n(t_\ell) + \frac{1}{2} f_{gur}^n(t_\ell) \right) + \left( \frac{1}{a_u^m} D_g^m(t_\ell) + \frac{1}{2} f_{gul}^m(t_\ell) \right)} . \quad (4.7)$$

Uma vez conhecido o coeficiente médio de difusão, as correntes líquidas nas faces do nodo, o fluxo médio de nêutrons e os fluxos nas faces do nodo, previamente calculados no NEM, os fatores de correção podem ser obtidos da seguinte forma:

$$f_{gul}^n(t_\ell) = \frac{\bar{J}_{gul}^n(t_\ell) + 2 \frac{D_g^n(t_\ell)}{a_u^n} \left( \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) - \bar{\Psi}_{gu}^n(u_l^n, t_\ell) \right)}{\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) + \bar{\Psi}_{gu}^n(u_l^n, t_\ell)} \quad (4.8)$$

e

$$f_{gur}^n(t_\ell) = - \frac{\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) - 2 \frac{D_g^n(t_\ell)}{a_u^n} \left( \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) - \bar{\Psi}_{gu}^n(u_r^n, t_\ell) \right)}{\bar{\varphi}_g^n(t_\ell) + \bar{\Psi}_{gu}^n(u_r^n, t_\ell)} . \quad (4.9)$$

Substituindo as Equações (4.4) e (4.5), generalizando para as direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , na Equação (4.2), obtém-se a seguinte equação para o fluxo médio no nodo,

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{a_x^n} D_{gxr}^{ne}(t_\ell) \widehat{\Phi}_g^{ne}(t_\ell) - \frac{1}{a_y^n} D_{gyr}^{nf}(t_\ell) \widehat{\Phi}_g^{nf}(t_\ell) - \frac{1}{a_z^n} D_{g zr}^{nb}(t_\ell) \widehat{\Phi}_g^{nb}(t_\ell) \\
& + \left\{ \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) + \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} [D_{gul}^n(t_\ell) + D_{gur}^n(t_\ell)] \right\} \widehat{\Phi}_g^n(t_\ell) \\
& - \frac{1}{a_x^n} D_{gxl}^{nd}(t_\ell) \widehat{\Phi}_g^{nd}(t_\ell) - \frac{1}{a_y^n} D_{gyl}^{nt}(t_\ell) \widehat{\Phi}_g^{nt}(t_\ell) - \frac{1}{a_z^n} D_{gzl}^{nc}(t_\ell) \widehat{\Phi}_g^{nc}(t_\ell) = \\
& \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}^n(t_\ell) \widehat{\Phi}_{g'}^n(t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{gg'}^n(t_\ell) \widehat{\Phi}_{g'}^n(t_\ell) + S_{ext,g}^n
\end{aligned} \tag{4.10}$$

A Equação (4.10) pode ser reescrita na seguinte forma matricial:

$$\begin{aligned}
& -B_{n,n_b}(t_\ell) \Phi^{n_b}(t_\ell) - B_{n,n_t}(t_\ell) \Phi^{n_t}(t_\ell) - B_{n,n_e}(t_\ell) \Phi^{n_e}(t_\ell) + B_{n,n}(t_\ell) \Phi^n(t_\ell) \\
& -B_{n,n_d}(t_\ell) \Phi^{n_d}(t_\ell) - B_{n,n_f}(t_\ell) \Phi^{n_f}(t_\ell) - B_{n,n_c}(t_\ell) \Phi^{n_c}(t_\ell) = \\
& F_n(t_\ell) \Phi^n(t_\ell) + E_n(t_\ell) \Phi^n(t_\ell) + S^n,
\end{aligned} \tag{4.11}$$

onde as matrizes estão definidas da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
F_n(t_\ell) & \equiv \begin{bmatrix} \chi_1 \nu \Sigma_{f_1}^n(t_\ell) & & \cdots & & \chi_1 \nu \Sigma_{f_G}^n(t_\ell) \\ & \ddots & & & \\ \vdots & & \chi_g \nu \Sigma_{f_g}^n(t_\ell) & & \vdots \\ & & & \ddots & \\ \chi_G \nu \Sigma_{f_1}^n(t_\ell) & & \cdots & & \chi_G \nu \Sigma_{f_G}^n(t_\ell) \end{bmatrix}, \\
E_n(t_\ell) & \equiv \begin{bmatrix} \Sigma_{11}^n(t_\ell) & & \cdots & & \Sigma_{1G}^n(t_\ell) \\ & \ddots & & & \\ \vdots & & \Sigma_{gg}^n(t_\ell) & & \vdots \\ & & & \ddots & \\ \Sigma_{G1}^n(t_\ell) & & \cdots & & \Sigma_{GG}^n(t_\ell) \end{bmatrix}, \\
\Phi^n(t_\ell) & \equiv \begin{bmatrix} \widehat{\Phi}_1^n(t_\ell) \\ \vdots \\ \widehat{\Phi}_g^n(t_\ell) \\ \vdots \\ \widehat{\Phi}_G^n(t_\ell) \end{bmatrix}, \quad S^n \equiv \begin{bmatrix} S_{ext,1}^n \\ \vdots \\ S_{ext,g}^n \\ \vdots \\ S_{ext,G}^n \end{bmatrix},
\end{aligned}$$

$$B_{n,m}(t_\ell) \equiv \begin{bmatrix} \frac{1}{a_u^n} D_{1ur}^m(t_\ell) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_u^n} D_{gur}^m(t_\ell) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a_u^n} D_{Gur}^m(t_\ell) \end{bmatrix}, \text{ para } m = \begin{cases} n_e, & \text{se } u = x \\ n_t, & \text{se } u = y \\ n_b, & \text{se } u = z \end{cases}$$

$$B_{n,m}(t_\ell) \equiv \begin{bmatrix} \frac{1}{a_u^n} D_{1ul}^m(t_\ell) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{a_u^n} D_{gul}^m(t_\ell) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{a_u^n} D_{Gul}^m(t_\ell) \end{bmatrix}, \text{ para } m = \begin{cases} n_d, & \text{se } u = x \\ n_f, & \text{se } u = y \\ n_c, & \text{se } u = z \end{cases} \text{ e}$$

$$B_{n,n}(t_\ell) \equiv \begin{bmatrix} B_1^n(t_\ell) & 0 & 0 \\ 0 & B_g^n(t_\ell) & 0 \\ 0 & 0 & B_G^n(t_\ell) \end{bmatrix},$$

sendo

$$B_g^n(t_\ell) \equiv \Sigma_{Rg}^n(t_\ell) + \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} [D_{gul}^n(t_\ell) + D_{gur}^n(t_\ell)].$$

Contabilizando todos os nodos em que o núcleo do reator foi dividido, a Equação (4.11) forma assim, um sistema heptadiagonal, semelhante ao método clássico de Diferenças Finitas. Por conveniência, escreve-se a equação anterior em uma estrutura bloco-heptadiagonal, conforme:

$$B_g(t_\ell) \underline{\Phi}_g(t_\ell) = \sum_{g'=1}^G F_{gg'}(t_\ell) \underline{\Phi}_{g'}(t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G E_{gg'}(t_\ell) \underline{\Phi}_{g'}(t_\ell) + \underline{S}_g, \quad (4.12)$$

com a matriz do fluxo médio de nêutrons expressa da seguinte forma,

$$\underline{\Phi}_g(t_\ell) \equiv \begin{bmatrix} \hat{\Phi}_g^1(t_\ell) \\ \vdots \\ \hat{\Phi}_g^n(t_\ell) \\ \vdots \\ \hat{\Phi}_g^N(t_\ell) \end{bmatrix}; \quad \hat{\Phi}_g^n(t_\ell) \equiv \begin{bmatrix} \hat{\Phi}_g^{n_b}(t_\ell) \\ \hat{\Phi}_g^{n_t}(t_\ell) \\ \hat{\Phi}_g^{n_e}(t_\ell) \\ \hat{\Phi}_g^n(t_\ell) \\ \hat{\Phi}_g^{n_d}(t_\ell) \\ \hat{\Phi}_g^{n_f}(t_\ell) \\ \hat{\Phi}_g^{n_c}(t_\ell) \end{bmatrix}, \text{ com } g = 1, \dots, G. \quad (4.13)$$



$$\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) = - \left( 2 \frac{D_g^n(t_\ell)}{a_u^n} - f_{gur}^n(t_\ell) \right) \bar{\varphi}_g^n(t_\ell) . \quad (4.15)$$

## 2) Condição de Contorno: Corrente de entrada nula

A obtenção de uma expressão para a corrente líquida na face do nodo é realizada abordando separadamente cada face do nodo voltada para o contorno.

A corrente de entrada nula na face direita do nodo é obtida assumindo que  $\bar{J}_{gur}^-n(t_\ell) = 0$ , então, a corrente líquida na face direita do nodo, expressa em função das correntes parciais fica

$$\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) = \bar{J}_{gur}^{+n}(t_\ell) - \bar{J}_{gur}^-n(t_\ell) = \bar{J}_{gur}^{+n}(t_\ell) . \quad (4.16)$$

A partir da aproximação da difusão, dada pela Equação (3.47), pode-se relacionar o fluxo médio na face direita do nodo em função das correntes parciais, conforme:

$$\bar{\Psi}_{gur}^n(t_\ell) = 2 \left( \bar{J}_{gur}^{+n}(t_\ell) + \bar{J}_{gur}^-n(t_\ell) \right) = 2\bar{J}_{gur}^{+n}(t_\ell) , \quad (4.17)$$

combinando as Equações (4.16) e (4.17), tem-se que

$$\bar{\Psi}_{gur}^n(t_\ell) = 2\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) . \quad (4.18)$$

Substituindo a Equação (4.18) na Equação (4.9) e fazendo algumas manipulações algébricas, a corrente líquida na face direita do nodo é expressa da seguinte forma:

$$\bar{J}_{gur}^n(t_\ell) = \frac{\left( 2 \frac{D_g^n(t_\ell)}{a_u^n} - f_{gur}^n(t_\ell) \right) \bar{\varphi}_g^n(t_\ell)}{1 + 4 \frac{D_g^n(t_\ell)}{a_u^n} + 2f_{gur}^n(t_\ell)} , \quad (4.19)$$

onde  $u = x, y, z$  e  $a_u^n$  é a dimensão do nodo  $n$  da direção  $u$ .

A corrente de entrada nula na face esquerda do nodo é obtida assumindo que  $\bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) = 0$ , então, a corrente líquida na face esquerda do nodo, expressa em função das correntes parciais fica

$$\bar{J}_{gul}^n(t_\ell) = \bar{J}_{gul}^{+n}(t_\ell) - \bar{J}_{gul}^{-n}(t_\ell) = \bar{J}_{gul}^{-n}(t_\ell) . \quad (4.20)$$

Fazendo uso da aproximação da difusão e da definição da corrente líquida na face esquerda em função das correntes parciais, tem-se que

$$\bar{\Psi}_{gul}^n(t_\ell) = -2\bar{J}_{gul}^n(t_\ell) . \quad (4.21)$$

Substituindo a Equação (4.21) na Equação (4.8) e fazendo algumas manipulações algébricas, obtém-se a corrente líquida na face esquerda do nodo, conforme:

$$\bar{J}_{gul}^n(t_\ell) = \frac{-\left(2 \frac{D_g^n(t_\ell)}{a_u^n} - f_{gul}^n(t_\ell)\right) \bar{\varphi}_g^n(t_\ell)}{1 + 4 \frac{D_g^n(t_\ell)}{a_u^n} + 2f_{gul}^n(t_\ell)} . \quad (4.22)$$

Tendo posse das equações apresentadas na discretização com o método DFMG e as condições de contorno, pode-se calcular, através de um processo iterativo, a distribuição de fluxo de nêutrons. Neste trabalho, a solução da equação de difusão de nêutrons discretizada pelo método DFMG foi obtida através de um programa de cálculo em linguagem FORTRAN para o cálculo da distribuição do fluxo de nêutrons, na qual emprega-se o método SOR (*Successive Over Relaxation*) (NAKAMURA, 1977), que é uma extensão do método de Gauss-Seidel, para as iterações externas. A Figura 4.2 apresenta o programa de cálculo utilizado para a obtenção da distribuição do fluxo de nêutrons utilizando o DFMG.

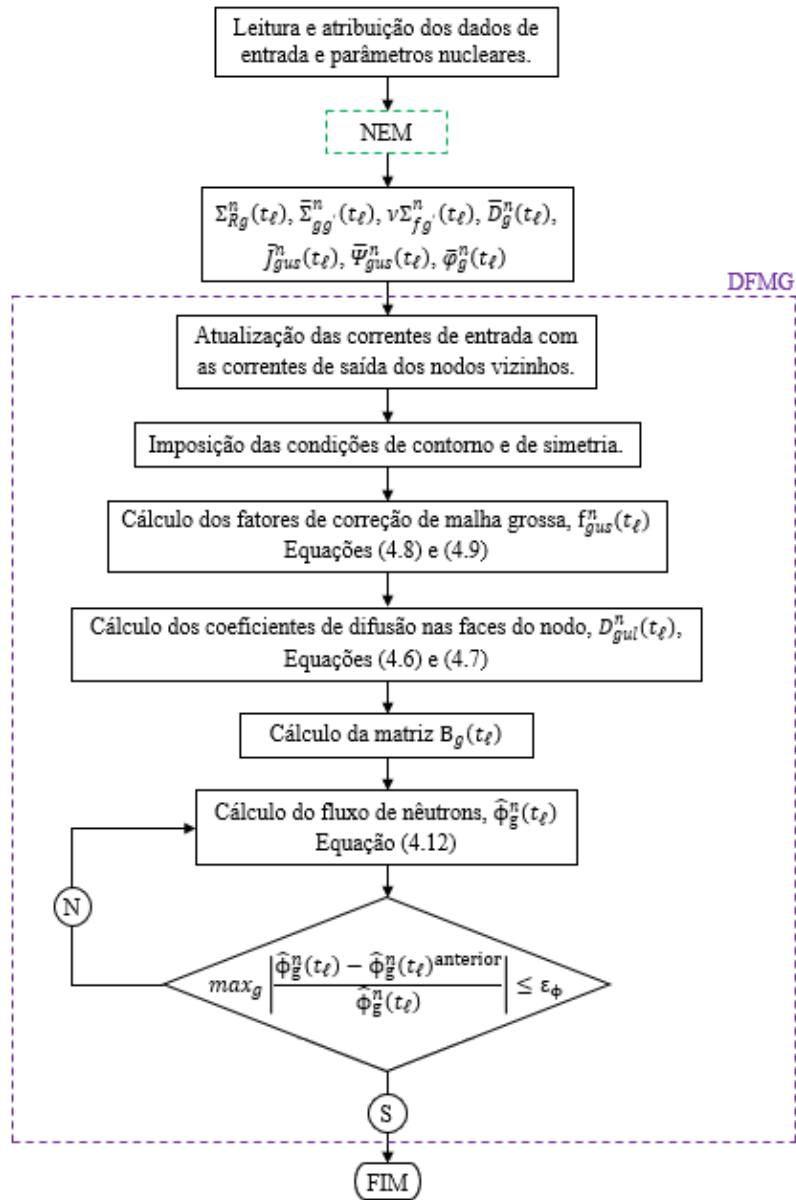


Figura 4.2: Sequência de cálculo nodal utilizando o DFMG.

### 4.3 Fluxograma de Cálculo de Depleção com DFMG

A metodologia de cálculo de depleção isotópica com DFMG utiliza o método das Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG) para obtenção direta dos fluxos de nêutrons,  $\hat{\Phi}_g^n(t_\ell)$ , dado pela Equação (4.12), no início de cada intervalo de queima  $[t_\ell, t_{\ell+1})$ . Com os fluxos e as concentrações isotópicas conhecidos em  $t_\ell$ , pode-se resolver a equação de depleção isotópica, dada na Equação (2.4), e finalmente,

determinar as concentrações isotópicas em  $t_{\ell+1}$ . A Figura 4.3 apresenta esta metodologia em maiores detalhes. Para um melhor entendimento, a seguinte sequência de cálculo é adotada para cada intervalo de queima  $[t_\ell, t_{\ell+1}]$ :

1. A cada início de um intervalo de queima, a subcriticalidade do sistema é ajustada, conforme o Mecanismo de Ajuste de Subcriticalidade apresentado na Seção 3.3.
2. Com os resultados obtidos no item 1, a Equação (4.12) é resolvida utilizando o método das Diferenças Finitas de Malha Grossa, na qual obtêm-se diretamente os fluxos de nêutrons,  $\widehat{\phi}_g^n(t_\ell)$ .
3. Usando a Equação (2.28), os fluxos médios de nêutrons  $\bar{\phi}_g^n(t_\ell)$  são calculados.
4. Usando as Equações (2.5), (2.6), (2.7), (2.8), (2.9) e (2.10), a matriz de evolução  $E_\ell^n$  é construída.
5. Utilizando o método proposto por ALVIM *et al.*, (2010), a Equação (2.4) é resolvida e obtêm-se as concentrações isotópicas para o instante  $t_{\ell+1}$ .
6. Repetir os itens 1 – 5 até o intervalo de tempo final  $L$ .

Os resultados obtidos por esta metodologia são usados como referência para a verificação da precisão dos resultados obtidos com a metodologia de depleção com PHE, que será apresentada no Capítulo 5.



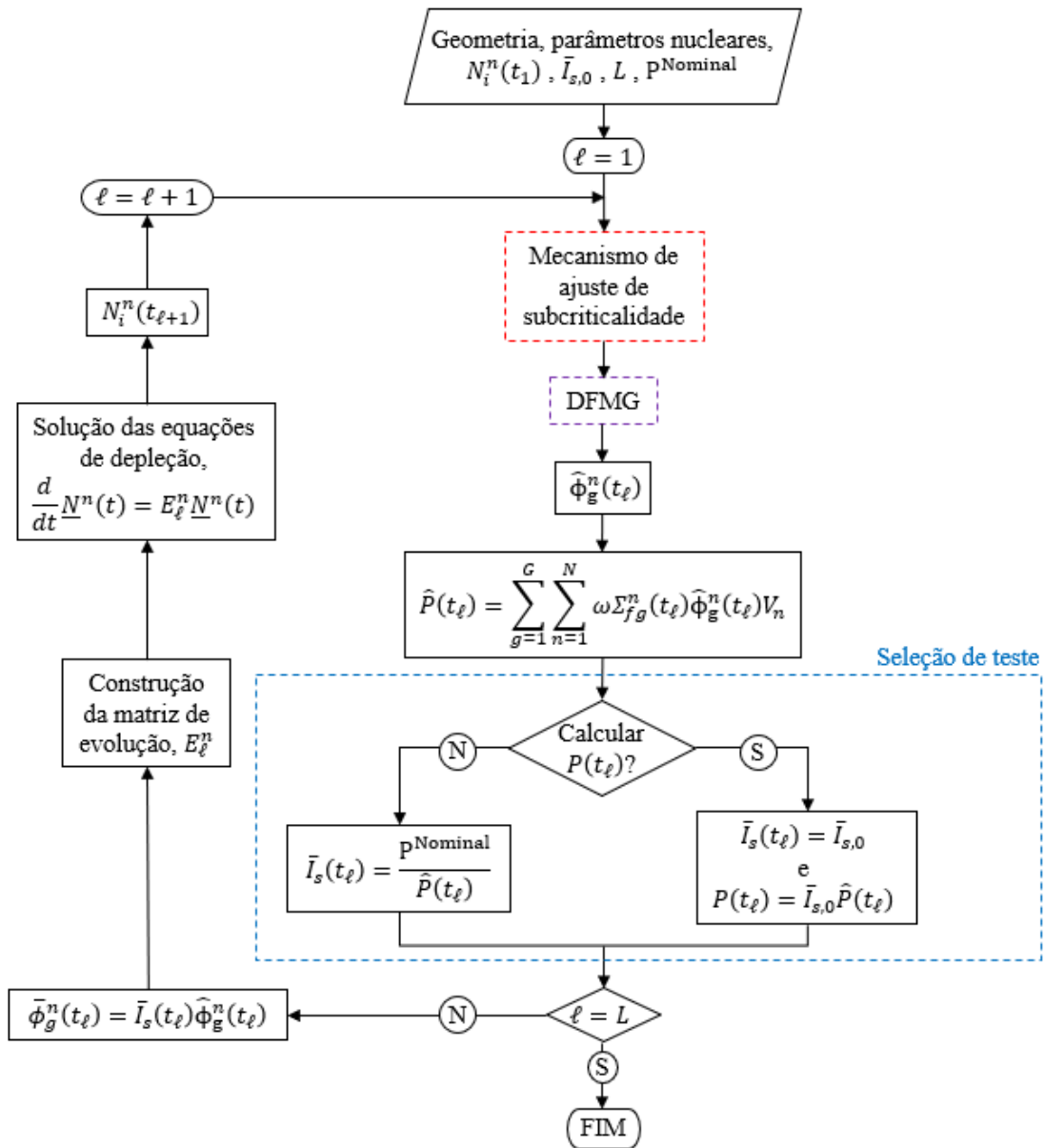


Figura 4.3: Sequência de cálculo de depleção isotópica usando o DFMG.

# 5 Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com PHE

## 5.1 Introdução

Em 1978, uma metodologia de perturbação explícita, chamada de *standard method*, ou método dos harmônicos foi proposta por GANDINI (1978). O método produzia excelentes resultados, quando aplicado a problemas unidimensionais e para um grupo de energia. No entanto, em problemas mais complexos, multidimensionais e multigrupos de energia, dificuldades numéricas e matemáticas eram observadas, levando a limitações em seu uso.

Em vista destas limitações, o método dos Pseudo-Harmônicos (GOMIT *et al.*, 1982, 1985) foi desenvolvido. Este método, também conhecido por método de Expansão em Pseudo-Harmônicos (PHE), consiste em se expandir, para cada grupo de energia, o fluxo de nêutrons em termos de uma base do espaço, gerado por um conjunto de autofunções, chamados de pseudo-harmônicos, associados a uma parte do operador de difusão, constituído apenas pelo operador de fuga mais remoção.

O método PHE possui certas características que facilitam os cálculos e a programação. Entre as quais, a representação do fluxo de nêutrons é obtida através de uma expansão em autofunções associadas a um operador autoadjunto, não havendo necessidade de se calcularem as autofunções adjuntas e implicando na ausência de casos complexos e degenerados. Também, os pseudo-harmônicos satisfazem às mesmas condições de contorno que o fluxo de nêutrons e são obtidos para cada grupo de energia, através de equações diferenciais desacopladas, facilitando assim sua aplicação em problemas que envolvem diversos grupos de energia. Além disso, a discretização espacial destas equações diferenciais fornecem matrizes reais e simétricas, implicando que os autovalores sejam reais e os autovetores ortogonais, formando um conjunto completo (SILVA *et al.*, 1987).

Os pseudo-harmônicos foram aplicados inicialmente com a discretização em Diferenças Finitas e posteriormente com a discretização nodal, obtendo excelentes resultados em variados problemas perturbativos estacionários e também mostraram

precisão em problemas com fonte fixa, não necessariamente perturbativos (LIMA *et al.*, 2004). Este método também foi aplicado com sucesso em conjunto com métodos nodais de malha grossa, como o DFMG (LIMA *et al.*, 2005).

Neste capítulo, a metodologia de cálculo de depleção isotópica utilizando o método PHE será descrita. Primeiramente, o método de Expansão em Pseudo-Harmônicos (PHE) será apresentado. Para tal, os pseudo-harmônicos foram obtidos a partir da matriz  $B_g(t_1)$ , que representa o termo de fuga mais remoção discretizada pelo método DFMG para o primeiro intervalo de queima, ou seja,  $\ell = 1$ . A opção pelo DFMG é conveniente devido a sua praticidade de construir a matriz fuga mais remoção, de maneira que os pseudo-harmônicos são determinados sem a necessidade de qualquer alteração no programa de cálculo apresentado na Figura 4.2. Por fim, a metodologia para obtenção das concentrações isotópicas através da expansão do fluxo de nêutrons em pseudo-harmônicos, discretizado em malha grossa, será descrito.

## 5.2 Método de Expansão em Pseudo-Harmônicos

Na metodologia de depleção isotópica por PHE, aqui desenvolvida, os pseudo-harmônicos são calculados a partir do termo de fuga mais remoção, matriz  $B_g(t_1)$ , obtido para o primeiro intervalo de queima utilizando a discretização da equação de difusão de nêutrons pelo método DFMG. Porém, observa-se que  $B_g(t_1)$  é uma matriz ligeiramente assimétrica (CLARO, 1992). Tendo em vista que na implementação do método PHE os pseudo-harmônicos são calculados a partir de uma matriz simétrica, é conveniente separar a parte simétrica desta matriz (LIMA, 2005). Para tal, a matriz  $B_g(t_1)$  é escrita em duas partes, uma simétrica e outra assimétrica, da seguinte forma:

$$B_g(t_1) = B_g^S(t_1) + B_g^{AS}(t_1) \quad , \quad (5.1)$$

onde  $B_g^S(t_1)$  é a parte simétrica, definida por

$$B_g^S(t_1) \equiv \frac{B_g(t_1) + B_g^T(t_1)}{2} \quad (5.2)$$

e  $B_g^{AS}(t_1)$  é a parte assimétrica, definida por

$$B_g^{AS}(t_1) \equiv \frac{B_g(t_1) - B_g^T(t_1)}{2} , \quad (5.3)$$

com  $B_g^T(t_1)$  sendo a matriz transposta da matriz  $B_g(t_1)$ .

Com a matriz  $B_g^S(t_1)$  separada, pode-se determinar o seguinte problema de autovalor:

$$B_g^S(t_1)\underline{W}_{g,j} = \lambda_{g,j}\underline{W}_{g,j} , \quad (5.4)$$

onde  $g = 1, G, j = 1, N$ , sendo  $N$  o número de nodos,  $\underline{W}_{g,j}$  são os pseudo-harmônicos e  $\lambda_{g,j}$  são os autovalores correspondentes da matriz  $B_g^S(t_1)$ .

Os pseudo-harmônicos satisfazem às mesmas condições de contorno impostas ao fluxo de nêutrons e, além disso, são ortogonais entre si formando um conjunto completo em um espaço de funções reais com o produto interno definido por:

$$\langle \underline{W}_{g,j}^T, \underline{W}_{g,k} \rangle = 0 ; \text{ para } j \neq k . \quad (5.5)$$

A aplicação dos pseudo-harmônicos em problemas de fonte fixa consiste basicamente em aproximar a solução do problema em uma expansão cujas funções de base são os próprios pseudo-harmônicos (LIMA *et al.*, 2005). Assim, tem-se um sistema linear na forma

$$B_g^S(t_1)\underline{\Phi}_g(t_\ell) = \underline{\hat{S}}_g(t_\ell) , \quad (5.6)$$

onde

$$\hat{\underline{S}}_g(t_\ell) \equiv \sum_{g'=1}^G F_{gg'}(t_\ell) \underline{\Phi}_{g'}(t_\ell) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G E_{gg'}(t_\ell) \underline{\Phi}_{g'}(t_\ell) - \hat{B}_g(t_\ell) \underline{\Phi}_g(t_\ell) + \underline{S}_g, \quad (5.7)$$

com

$$\hat{B}_g(t_\ell) = \delta B_g(t_\ell) + B_g^{AS}(t_1), \quad (5.8)$$

onde

$$\delta B_g(t_\ell) = B_g(t_\ell) - B_g(t_1), \quad (5.9)$$

com sua solução dada pela seguinte expansão:

$$\underline{\Phi}_g(t_\ell) = \sum_{j=1}^N c_{g,j}(t_\ell) \underline{W}_{g,j}; \quad \text{para } g = 1, G \text{ e } j = 1, \dots, N. \quad (5.10)$$

Substituindo a expansão dada na Equação (5.10) na Equação (5.6) e usando a Equação (5.4), tem-se que:

$$B_g^S(t_\ell) \underline{\Phi}_g(t_\ell) = \sum_{j=1}^N c_{g,j}(t_\ell) \lambda_{g,j} \underline{W}_{g,j} = \hat{\underline{S}}_g(t_\ell), \quad (5.11)$$

sendo os coeficientes da expansão dados por:

$$c_{g,j}(t_\ell) = \frac{\langle \underline{W}_{g,j}^T \hat{\underline{S}}_g(t_\ell) \rangle}{\lambda_{g,j} \langle \underline{W}_{g,j}^T \underline{W}_{g,j} \rangle}; \quad \text{para } g = 1, G. \quad (5.12)$$

De acordo com a Equação (5.7),  $\hat{\underline{S}}_g(t_\ell)$  depende de  $\underline{\Phi}_g(t_\ell)$ . Desse modo, um processo de cálculo iterativo é adotado, fazendo  $\underline{\Phi}_g^{(0)}(t_\ell) = \underline{\Phi}_g(t_{\ell-1})$ . O processo iterativo é finalizado quando o seguinte critério é satisfeito:

$$\max_g \left| \frac{\hat{\Phi}_g^n(t_\ell) - \hat{\Phi}_g^n(t_\ell)^{\text{anterior}}}{\hat{\Phi}_g^n(t_\ell)} \right| \leq \varepsilon_1, \quad (5.13)$$

onde  $\varepsilon_1$  é um parâmetro predeterminado referente à tolerância para o fluxo de nêutrons.

Pode-se observar que a discretização da equação de difusão de nêutrons utilizando DFMG conduz a uma fácil implementação dos pseudo-harmônicos, onde o operador de fuga mais remoção pode ser representado por uma estrutura matricial conveniente para a obtenção dos pseudo-harmônicos. Isto é devido o DFMG preservar a estrutura básica do método clássico das Diferenças Finitas, com matrizes bem definidas. Em outros métodos nodais, como por exemplo o NEM, esta característica não é observada.

### 5.3 Fluxograma de Cálculo de Depleção com PHE

Nesta metodologia de cálculo de depleção isotópica, o método DFMG é usado somente no primeiro instante de queima, ou seja, em  $\ell = 1$ , para obtenção do coeficiente de difusão,  $D_g^n(t_1)$ , seção de choque macroscópica de remoção,  $\Sigma_{Rg}^n(t_1)$ , e o fluxo de nêutrons,  $\hat{\Phi}_g^n(t_1)$ . Também, o DFMG fornece a matriz  $B_g(t_1)$ , sendo a parte simétrica,  $B_g^S(t_1)$ , usada para o cálculo dos pseudo-harmônicos e autovalores e a parte assimétrica,  $B_g^{AS}(t_1)$ , usada no cálculo da fonte  $\hat{S}_g(t_\ell)$ , dada pela Equação (5.7). Os pseudo-harmônicos, dados para cada nodo  $n$ ,  $w_{g,j}^n$ , e os autovalores,  $\lambda_{g,j}$ , são calculados através da subrotina DEVCSF (IMSL, 2010). Após os pseudo-harmônicos e autovalores serem calculados, os mesmos são mantidos em arquivos, conforme feito em parâmetros nucleares.

O fluxo de nêutrons  $\hat{\Phi}_g^n(t_1)$  é usado para calcular as concentrações isotópicas para o primeiro instante de queima, enquanto que  $D_g^n(t_1)$  e  $\Sigma_{Rg}^n(t_1)$  são usados na Equação (5.9) para obtenção de  $\delta B_g(t_\ell)$  e posteriormente para o cálculo da fonte  $\hat{S}_g(t_\ell)$ , dada pela Equação (5.7). Então, através do método de Expansão em Pseudo-Harmônicos (PHE), apresentado na Seção 5.2, o fluxo de nêutrons,  $\hat{\Phi}_g^n(t_\ell)$ , é obtido para os demais instantes de queima. A Figura 5.1 apresenta em maiores detalhes a metodologia de cálculo de depleção isotópica usando PHE. Esta metodologia utiliza o mesmo mecanismo de ajuste de subcriticalidade e a seleção de testes da metodologia anterior, conforme apresentado na Figura 3.5 e Figura 4.3, respectivamente:

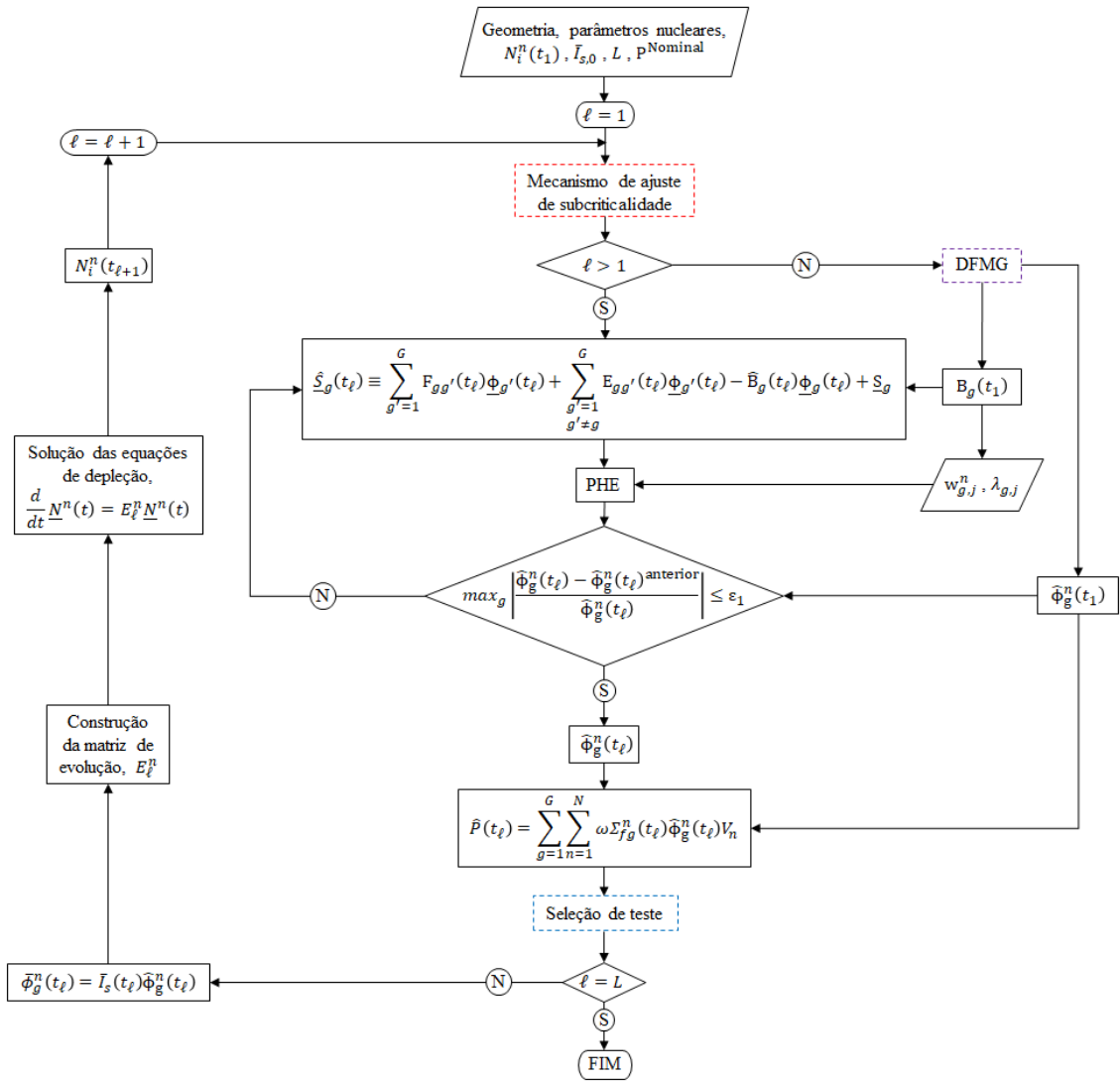


Figura 5.1: Sequência de cálculo de depleção isotópica usando o PHE.

# 6 Apresentação e Análise dos Resultados

## 6.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos obtidos pelas metodologias de cálculo de depleção desenvolvidas nos Capítulos 4 e 5. Para tal, dois sistemas subcríticos acionados por uma fonte externa de nêutrons foram utilizados para demonstrar a aplicabilidade de ambas metodologias. As respectivas dimensões, condições de contorno, intervalos de queima e composições isotópicas iniciais, assim como os dados nucleares utilizados, são descritos.

Também, dois testes foram realizados em ambas configurações, onde em um deles considerou-se a intensidade da fonte externa de nêutrons fixa ao longo do tempo e o outro, a potência de operação do sistema foi mantida fixa ao longo do tempo. Por fim, avaliaram-se os resultados obtidos e comparou-se o custo computacional para ambas as metodologias.

## 6.2 Apresentação dos Núcleos Teste

Dois casos de estudo foram escolhidos para ilustrar a aplicabilidade das duas metodologias de depleção isotópica desenvolvidas neste trabalho. Os dois núcleos subcríticos, chamados de núcleo A e B, foram simulados em duas dimensões (2D) e suas configurações estão apresentadas nas Figuras 6.1 e 6.2, respectivamente.

O núcleo A representa um reator de pequeno porte que gera 45 MW de potência e opera com um ciclo de 90 dias, como é o caso do núcleo do reator do projeto MYRRHA (ABDERRAHIM *et al.*, 2003 e 2005, ABDERRAHIM *et al.*, 2007, HAECK *et al.*, 2006). O núcleo A é composto por três elementos de combustível homogêneos (FA01, FA02 e FA03), duas regiões refletoras (R01 e R02) e uma fonte externa de nêutrons (ENS). A largura de cada elemento combustível, assim como para a região dos refletores e para a região ocupada pela fonte externa de nêutrons, é de 8,0 cm. Apesar



dos cálculos serem em 2D, uma altura ativa de 60,0 cm foi considerada para determinar o volume ocupado pela fonte externa de nêutrons (ABDERRAHIM *et al.*, 2007).

O núcleo B representa um reator de grande porte que gera 800 MW de potência e opera com um ciclo de 600 dias, como é o caso do núcleo do reator do projeto JAERI (TSUJIMOTO *et al.*, 2004, CHIBA *et al.*, 2016, SUGAWARA *et al.*, 2016). O núcleo B é composto por dois elementos de combustível homogêneos (FA01 e FA04), duas regiões refletoras (R01 e R02), a região do *buffer* (B) e uma fonte externa de nêutrons (ENS). A largura de cada elemento combustível, assim como para a região dos refletores e *buffer*, é de 17,3 cm. A região ocupada pela fonte externa de nêutrons possui largura de 51,9 cm, ou seja, a mesma foi subdividida em 3x3 nodos de 17,3 cm. Assim como no núcleo A, foi considerado uma altura ativa de 100,0 cm para determinar o volume ocupado pela fonte externa de nêutrons (TSUJIMOTO *et al.*, 2004).

Todos os cálculos foram feitos considerando 1 nodo por elemento combustível. A condição fluxo nulo foi considerada no contorno externo do domínio espacial para ambos os núcleos.

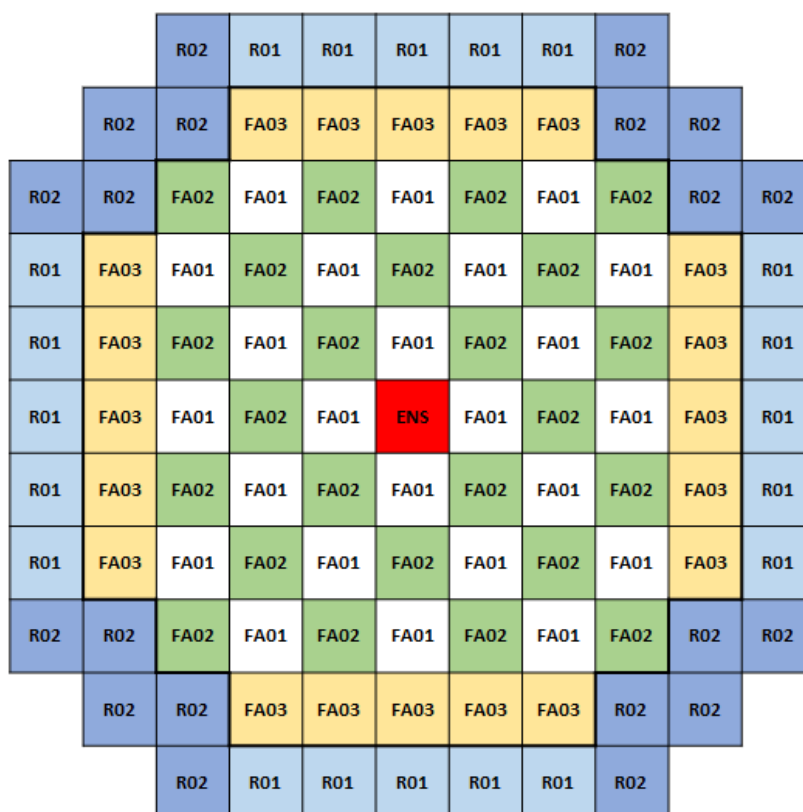


Figura 6.1: Configuração do núcleo A.



Assim, com o objetivo de verificar a aplicabilidade de ambas metodologias desenvolvidas neste trabalho, foram usados dados nucleares para dois grupos de energia e cadeias de depleção de actínídeos e produtos de fissão simples, conforme mostrado nas Figuras 6.3 e 6.4, respectivamente. A cadeia dos actínídeos é formada por 15 nuclídeos, ordenados conforme apresentado na Tabela 6.1, e a cadeia dos produtos de fissão é formada por 5 nuclídeos, tais quais,  $^{135}\text{I}$ ,  $^{135}\text{Xe}$ ,  $^{149}\text{Pm}$ ,  $^{149}\text{Sm}$  e pelos produtos de fissão agrupados (LFP).

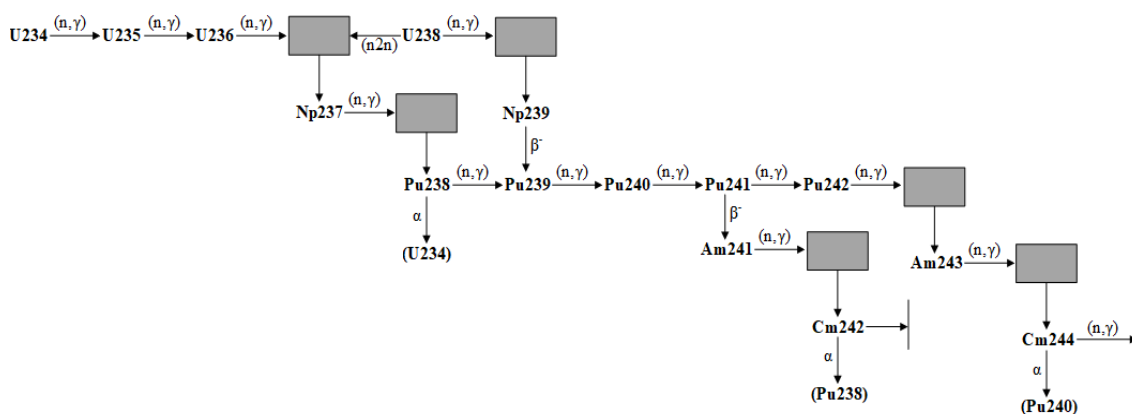


Figura 6.3: Cadeia de depleção dos actínídeos.

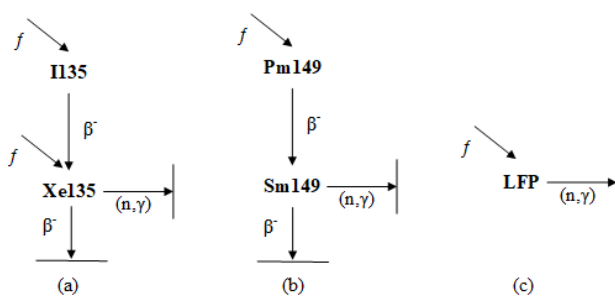


Figura 6.4: Cadeia de depleção dos produtos de fissão (PF).

Os dados referentes às cadeias de depleção são apresentados nas Tabelas 6.1 e 6.2. As seções de choque microscópicas usadas nos cálculos são apresentadas nas Tabelas 6.3 a 6.7 e as energias liberadas nas fissões dos actínídeos são mostradas na Tabela 6.8. As seções de choque macroscópicas dos refletores e material estrutural (STRM), presentes nas regiões da fonte externa de nêutrons e do *buffer* (cujos parâmetros nucleares são os mesmos da região ENS), são mostradas na Tabela 6.9. As demais

seções de choque macroscópicas, incluindo aquelas do material absorvedor utilizado no ajuste de subcriticalidade do reator, são dispostas nas Tabelas 6.10 e 6.11. Todos os dados nucleares usados neste trabalho foram obtidos a partir do sistema de geração de dados nucleares do CNFR (SILVA *et al.*, 2010, PRATA *et al.*, 2013, HEIMLICH *et al.*, 2016, 2018).

Tabela 6.1: Produção dos produtos de fissão.

<i>i</i>	Actinídeos	$\gamma_{ij}$			
		<i>j</i> = 16 ( <sup>149</sup> Pm)	<i>j</i> = 18 ( <sup>135</sup> I)	<i>j</i> = 19 ( <sup>135</sup> Xe)	<i>j</i> = 20 (LFP)
1	<sup>234</sup> U	0,0107	0,0630	0,0024	1,00
2	<sup>235</sup> U	0,0107	0,0630	0,0024	1,00
3	<sup>236</sup> U	0,0107	0,0630	0,0024	1,00
4	<sup>237</sup> Np	0,0107	0,0630	0,0024	1,00
5	<sup>238</sup> U	0,0161	0,0683	0,0003	1,00
6	<sup>238</sup> Pu	0,0124	0,0645	0,0115	1,00
7	<sup>239</sup> Np	0,0	0,0	0,0	0,0
8	<sup>239</sup> Pu	0,0124	0,0645	0,0115	1,00
9	<sup>240</sup> Pu	0,0124	0,0645	0,0115	1,00
10	<sup>241</sup> Pu	0,0152	0,0707	0,0023	1,00
11	<sup>241</sup> Am	0,0152	0,0707	0,0023	1,00
12	<sup>242</sup> Pu	0,0152	0,0707	0,0023	1,00
13	<sup>242</sup> Cm	0,0152	0,0707	0,0023	1,00
14	<sup>243</sup> Am	0,0152	0,0707	0,0023	1,00
15	<sup>244</sup> Cm	0,0152	0,0707	0,0023	1,00

Tabela 6.2: Constantes de decaimento, em  $s^{-1}$ .

$\lambda_{Pu238}$	2,513E-10
$\lambda_{Np239}$	3,410E-06
$\lambda_{Pu241}$	1,536E-09
$\lambda_{Cm242}$	4,922E-08
$\lambda_{Cm244}$	1,213E-09
$\lambda_{Pm149}$	3,626E-06
$\lambda_{I135}$	2,924E-05
$\lambda_{Xe135}$	2,100E-05

Tabela 6.3: Seções de choque microscópicas para o FA01, em *barn*.

$i$	$g$	$\sigma_{c,g}^i$	$\sigma_{f,g}^i$	$\sigma_{vf,g}^i$	$\sigma_{s,i}^{g \rightarrow 3-g}$
$^{234}\text{U}$	1	1,75446E+01	5,14935E-01	1,35775E+00	2,92045E-03
	2	4,47578E+01	0,0	0,0	0,0
$^{235}\text{U}$	1	4,12848E+00	8,98581E+00	2,18712E+01	3,14296E-03
	2	4,83330E+01	2,69989E+02	6,53050E+02	0,0
$^{236}\text{U}$	1	9,90998E+00	2,27614E-01	6,25059E-01	2,52497E-03
	2	3,10646E+00	0,0	0,0	0,0
$^{238}\text{U}$	1	7,99290E-01	1,19564E-01	3,34983E-01	1,96892E-03
	2	1,36972E+00	0,0	0,0	0,0
$^{237}\text{Np}$	1	2,01812E+01	5,89959E-01	1,53979E+00	0,0
	2	1,24397E+02	0,0	0,0	0,0
$^{238}\text{Pu}$	1	6,52498E+00	1,24468E+00	3,42287E+00	0,0
	2	2,51307E+02	0,0	0,0	0,0
$^{239}\text{Pu}$	1	5,85551E+00	9,74299E+00	2,78473E+01	2,42144E-03
	2	3,93978E+02	7,21712E+02	2,06756E+03	0,0
$^{240}\text{Pu}$	1	2,63723E+02	7,24244E-01	2,19998E+00	1,17258E-03
	2	1,80480E+02	4,08494E-02	1,13349E-01	0,0
$^{241}\text{Pu}$	1	5,56862E+00	1,83295E+01	5,36511E+01	1,94173E-03
	2	2,50647E+02	7,44460E+02	2,17129E+03	0,0
$^{241}\text{Am}$	1	3,14798E+01	7,60773E-01	2,74154E+00	3,42698E-03
	2	6,19697E+02	4,13820E+00	1,37802E+01	0,0
$^{242}\text{Pu}$	1	3,51599E+01	5,07107E-01	1,57434E+00	1,71381E-03
	2	1,00288E+01	7,77119E-03	2,18215E-02	0,0
$^{242}\text{Cm}$	1	3,94349E+00	9,05937E-01	3,11137E+00	2,19355E-03
	2	7,83676E+00	2,81445E+00	8,86553E+00	0,0
$^{243}\text{Am}$	1	4,86434E+01	4,03118E-01	1,20935E+00	0,0
	2	6,08703E+01	0,0	0,0	0,0
$^{244}\text{Cm}$	1	1,67361E+01	1,01791E+00	3,79981E+00	2,33965E-03
	2	5,20072E+00	2,83351E-01	9,80395E-01	0,0
$^{149}\text{Sm}$	1	9,97340E+01	0,0	0,0	0,0
	2	4,50475E+04	0,0	0,0	0,0
$^{135}\text{Xe}$	1	1,41073E+02	0,0	0,0	0,0
	2	1,49832E+06	0,0	0,0	0,0
LFP	1	1,26484E+01	0,0	0,0	0,0
	2	1,03802E+02	0,0	0,0	0,0

Tabela 6.4: Seções de choque microscópicas para o FA02, em *barn*.

$i$	$g$	$\sigma_{c,g}^i$	$\sigma_{f,g}^i$	$\sigma_{vf,g}^i$	$\sigma_{s,i}^{g \rightarrow 3-g}$
$^{234}\text{U}$	1	1,70028E+01	5,21570E-01	1,37500E+00	2,87207E-03
	2	4,29350E+01	0,0	0,0	0,0
$^{235}\text{U}$	1	3,99514E+00	8,73864E+00	2,12749E+01	3,08904E-03
	2	4,65759E+01	2,59439E+02	6,27532E+02	0,0
$^{236}\text{U}$	1	9,62234E+00	2,30519E-01	6,32814E-01	2,47817E-03
	2	2,99563E+00	0,0	0,0	0,0
$^{238}\text{U}$	1	7,89723E-01	1,20945E-01	3,38738E-01	1,93016E-03
	2	1,32124E+00	0,0	0,0	0,0
$^{237}\text{Np}$	1	1,95919E+01	5,97691E-01	1,55997E+00	0,0
	2	1,26724E+02	0,0	0,0	0,0
$^{238}\text{Pu}$	1	6,30832E+00	1,26005E+00	3,46514E+00	0,0
	2	2,42201E+02	0,0	0,0	0,0
$^{239}\text{Pu}$	1	5,71148E+00	9,51708E+00	2,72094E+01	2,45543E-03
	2	3,97621E+02	7,21017E+02	2,06552E+03	0,0
$^{240}\text{Pu}$	1	2,51997E+02	7,28764E-01	2,21465E+00	1,14110E-03
	2	1,76841E+02	3,99262E-02	1,10787E-01	0,0
$^{241}\text{Pu}$	1	5,41346E+00	1,78482E+01	5,22497E+01	1,98124E-03
	2	2,45852E+02	7,27012E+02	2,12040E+03	0,0
$^{241}\text{Am}$	1	3,04303E+01	7,60437E-01	2,74274E+00	3,39216E-03
	2	6,32009E+02	4,25331E+00	1,41635E+01	0,0
$^{242}\text{Pu}$	1	3,40387E+01	5,12859E-01	1,59217E+00	1,72780E-03
	2	9,71067E+00	7,51965E-03	2,11152E-02	0,0
$^{242}\text{Cm}$	1	3,85919E+00	9,11452E-01	3,13142E+00	2,17333E-03
	2	7,56540E+00	2,73725E+00	8,62235E+00	0,0
$^{243}\text{Am}$	1	4,69415E+01	4,08494E-01	1,22548E+00	0,0
	2	5,82547E+01	0,0	0,0	0,0
$^{244}\text{Cm}$	1	1,62350E+01	1,01820E+00	3,80382E+00	2,27744E-03
	2	5,05136E+00	2,74132E-01	9,48495E-01	0,0
$^{149}\text{Sm}$	1	9,58314E+01	0,0	0,0	0,0
	2	4,30745E+04	0,0	0,0	0,0
$^{135}\text{Xe}$	1	1,34943E+02	0,0	0,0	0,0
	2	1,42269E+06	0,0	0,0	0,0
LFP	1	1,23656E+01	0,0	0,0	0,0
	2	1,00008E+02	0,0	0,0	0,0

Tabela 6.5: Seções de choque microscópicas para o FA03, em *barn*.

$i$	$g$	$\sigma_{c,g}^i$	$\sigma_{f,g}^i$	$\sigma_{vf,g}^i$	$\sigma_{s,i}^{g \rightarrow 3-g}$
$^{234}\text{U}$	1	1.64888E+01	5.27245E-01	1.38975E+00	2.81505E-03
	2	4.11038E+01	0.0	0.0	0.0
$^{235}\text{U}$	1	3.87563E+00	8.51443E+00	2.07338E+01	3.02373E-03
	2	4.48011E+01	2.48834E+02	6.01880E+02	0.0
$^{236}\text{U}$	1	9.35021E+00	2.32985E-01	6.39412E-01	2.42355E-03
	2	2.88383E+00	0.0	0.0	0.0
$^{238}\text{U}$	1	7.80027E-01	1.22126E-01	3.41960E-01	1.88947E-03
	2	1.27238E+00	0.0	0.0	0.0
$^{237}\text{Np}$	1	1.90408E+01	6.04283E-01	1.57718E+00	0.0
	2	1.29059E+02	0.0	0.0	0.0
$^{238}\text{Pu}$	1	6.10502E+00	1.27331E+00	3.50161E+00	0.0
	2	2.33018E+02	0.0	0.0	0.0
$^{239}\text{Pu}$	1	5.57693E+00	9.30543E+00	2.66117E+01	2.46839E-03
	2	4.00485E+02	7.19206E+02	2.06029E+03	0.0
$^{240}\text{Pu}$	1	2.40839E+02	7.32363E-01	2.22647E+00	1.11272E-03
	2	1.73115E+02	3.89848E-02	1.08175E-01	0.0
$^{241}\text{Pu}$	1	5.26686E+00	1.73943E+01	5.09274E+01	1.99970E-03
	2	2.40784E+02	7.08712E+02	2.06703E+03	0.0
$^{241}\text{Am}$	1	2.94444E+01	7.59452E-01	2.74144E+00	3.34250E-03
	2	6.43530E+02	4.36179E+00	1.45248E+01	0.0
$^{242}\text{Pu}$	1	3.29931E+01	5.17687E-01	1.60717E+00	1.72809E-03
	2	9.38878E+00	7.26535E-03	2.04011E-02	0.0
$^{242}\text{Cm}$	1	3.77281E+00	9.17469E-01	3.15319E+00	2.17496E-03
	2	7.11500E+00	2.59627E+00	8.17825E+00	0.0
$^{243}\text{Am}$	1	4.53498E+01	4.13038E-01	1.23911E+00	0.0
	2	5.56562E+01	0.0	0.0	0.0
$^{244}\text{Cm}$	1	1.57424E+01	1.01786E+00	3.80537E+00	2.22262E-03
	2	4.83293E+00	2.61145E-01	9.03563E-01	0.0
$^{149}\text{Sm}$	1	9.21542E+01	0.0	0.0	0.0
	2	4.10667E+04	0.0	0.0	0.0
$^{135}\text{Xe}$	1	1.29172E+02	0.0	0.0	0.0
	2	1.34671E+06	0.0	0.0	0.0
LFP	1	1.20816E+01	0.0	0.0	0.0
	2	9.59737E+01	0.0	0.0	0.0

Tabela 6.6: Seções de choque microscópicas para o FA04, em *barn*.

$i$	$g$	$\sigma_{c,g}^i$	$\sigma_{f,g}^i$	$\sigma_{vf,g}^i$	$\sigma_{s,i}^{g \rightarrow 3-g}$
$^{234}\text{U}$	1	1,64844E+01	5,27278E-01	1,38984E+00	2,81366E-03
	2	4,10870E+01	0,0	0,0	0,0
$^{235}\text{U}$	1	3,87437E+00	8,51227E+00	2,07285E+01	3,02290E-03
	2	4,47831E+01	2,48738E+02	6,01648E+02	0,0
$^{236}\text{U}$	1	9,34784E+00	2,32996E-01	6,39443E-01	2,42251E-03
	2	2,88281E+00	0,0	0,0	0,0
$^{238}\text{U}$	1	7,79874E-01	1,22130E-01	3,41969E-01	1,88786E-03
	2	1,27193E+00	0,0	0,0	0,0
$^{237}\text{Np}$	1	1,90360E+01	6,04317E-01	1,57727E+00	0,0
	2	1,29080E+02	0,0	0,0	0,0
$^{238}\text{Pu}$	1	6,10326E+00	1,27340E+00	3,50185E+00	0,0
	2	2,32934E+02	0,0	0,0	0,0
$^{239}\text{Pu}$	1	5,57583E+00	9,30365E+00	2,66067E+01	2,46736E-03
	2	4,00510E+02	7,19182E+02	2,06022E+03	0,0
$^{240}\text{Pu}$	1	2,40743E+02	7,32373E-01	2,22650E+00	1,11141E-03
	2	1,73081E+02	3,89761E-02	1,08151E-01	0,0
$^{241}\text{Pu}$	1	5,26566E+00	1,73904E+01	5,09160E+01	1,99947E-03
	2	2,40735E+02	7,08542E+02	2,06653E+03	0,0
$^{241}\text{Am}$	1	2,94359E+01	7,59420E-01	2,74134E+00	3,34173E-03
	2	6,43629E+02	4,36275E+00	1,45279E+01	0,0
$^{242}\text{Pu}$	1	3,29842E+01	5,17711E-01	1,60724E+00	1,72726E-03
	2	9,38585E+00	7,26302E-03	2,03946E-02	0,0
$^{242}\text{Cm}$	1	3,77485E+00	9,17332E-01	3,15276E+00	2,15925E-03
	2	7,19350E+00	2,62431E+00	8,26657E+00	0,0
$^{243}\text{Am}$	1	4,53356E+01	4,13066E-01	1,23920E+00	0,0
	2	5,56248E+01	0,0	0,0	0,0
$^{244}\text{Cm}$	1	1,57325E+01	1,01763E+00	3,80456E+00	2,22416E-03
	2	4,82202E+00	2,60535E-01	9,01452E-01	0,0
$^{149}\text{Sm}$	1	9,21224E+01	0,0	0,0	0,0
	2	4,10481E+04	0,0	0,0	0,0
$^{135}\text{Xe}$	1	1,29121E+02	0,0	0,0	0,0
	2	1,34602E+06	0,0	0,0	0,0
LFP	1	1,20784E+01	0,0	0,0	0,0
	2	9,59317E+01	0,0	0,0	0,0



Tabela 6.7: Seção de choque microscópica da reação  $n2n$  do  $^{238}\text{U}$ ,  $\sigma_{n2n,g}^{U238}$ , em *barn*.

FA01	6,16820E-03
FA02	6,17018E-03
FA03	6,16649E-03
FA04	6,16607E-03

Tabela 6.8: Energia liberada por fissão, em *Joule*.

$i$	$g$	$\omega_g^i$
$^{234}\text{U}$	1	3,24000E-11
	2	0,0
$^{235}\text{U}$	1	3,24000E-11
	2	3,24000E-11
$^{236}\text{U}$	1	3,24000E-11
	2	0,0
$^{238}\text{U}$	1	3,20000E-11
	2	3,24000E-11
$^{237}\text{Np}$	1	0,0
	2	0,0
$^{238}\text{Pu}$	1	3,20000E-11
	2	0,0
$^{239}\text{Pu}$	1	3,35000E-11
	2	3,35000E-11
$^{240}\text{Pu}$	1	3,36000E-11
	2	3,36000E-11
$^{241}\text{Pu}$	1	3,38000E-11
	2	3,38000E-11
$^{241}\text{Am}$	1	3,38000E-11
	2	3,38000E-11
$^{242}\text{Pu}$	1	3,38000E-11
	2	3,38000E-11
$^{242}\text{Cm}$	1	3,38000E-11
	2	3,38000E-11
$^{243}\text{Am}$	1	3,38000E-11
	2	0,0
$^{244}\text{Cm}$	1	3,38000E-11
	2	3,38000E-11

Tabela 6.9: Seções de choque macroscópicas das regiões R01, R02 e ENS, em  $cm^{-1}$ .

Parâmetros	g	R01	R02	ENS
$\Sigma_{cg}$	1	2,141871E-03	2,383432E-03	8,4748E-04
	2	2,999635E-02	3,230039E-02	1,6848E-02
$\Sigma_{trg}$	1	3,723898E-01	3,880806E-01	3,5917E-02
	2	1,409764E+00	1,400553E+00	2,2048E-01
$\Sigma_s^{g \rightarrow 3-g}$	1	2,786050E-02	2,577570E-02	1,5468E-04
	2	0,0	0,0	0,0

Tabela 6.10: Seções de choque macroscópicas para o núcleo A, em  $cm^{-1}$ .

Parâmetros	g	FA01	FA02	FA03
$\Sigma_{cg}^{STRM,m}$	1	4,034140E-04	3,984615E-04	3,942505E-04
	2	5,850509E-03	5,785088E-03	5,722685E-03
$\Sigma_{trg}^{STRM,m}$	1	2,346291E-01	2,331853E-01	2,323923E-01
	2	8,549218E-01	8,548711E-01	8,565982E-01
$\Sigma_{gg'}^{STRM,m}$	1	1,699202E-02	1,639731E-02	1,584482E-02
	2	0,0	0,0	0,0
$\Sigma_{cg}^{Absorber,m}$	1	7,952852E-04	7,713582E-04	6,691775E-01
	2	3,378145E-02	2,983417E+01	2,951582E+01
$\Sigma_{gg'}^{Absorber,m}$	1	1,997413E-06	1,916524E-06	1,841017E-06
	2	0,0	0,0	0,0

Tabela 6.11: Seções de choque macroscópicas para o núcleo B, em  $cm^{-1}$ .

Parâmetros	g	FA01	FA04
$\Sigma_{cg}^{STRM,m}$	1	4,034140E-04	3,942473E-04
	2	5,850509E-03	5,722191E-03
$\Sigma_{trg}^{STRM,m}$	1	2,346291E-01	2,324134E-01
	2	8,549218E-01	8,566511E-01
$\Sigma_{gg'}^{STRM,m}$	1	1,699202E-02	1,584015E-02
	2	0,0	0,0
$\Sigma_{cg}^{Absorber,m}$	1	1,988213E-03	1,872750E-03
	2	8,445361E-02	8,261553E-02
$\Sigma_{gg'}^{Absorber,m}$	1	4,993532E-06	4,600888E-06
	2	0,0	0,0

As duas metodologias de cálculo de depleção isotópica, desenvolvidas neste trabalho, foram utilizadas em dois tipos de problemas, chamados de Teste 1 e Teste 2,

para verificar o comportamento de ambos os núcleos ao longo de seus respectivos ciclos de queima. A partir da Equação (2.33), o Teste 1 analisa as variações da potência de operação do sistema enquanto a intensidade da fonte externa de nêutrons é mantida constante, ao passo que o Teste 2 analisa a variação da intensidade da fonte externa de nêutrons enquanto a potência de operação do sistema é mantida constante. Nas próximas seções, Seção 6.3 e 6.4, os resultados dos dois testes são apresentados para os núcleos A e B, respectivamente.

### 6.3 Resultados para o Núcleo A

A concentração inicial dos nuclídeos presentes nos três elementos combustíveis do núcleo A são disponibilizados na Tabela 6.12. A duração do ciclo de queima considerados nestes cálculos foi de 90 dias (HAECK *et al.*, 2006), na qual foi dividido em 8 intervalos de queima ( $\Delta t_\ell \equiv t_{\ell+1} - t_\ell$ ), conforme mostrado na Tabela 6.13.

Tabela 6.12: Concentrações iniciais dos nuclídeos do núcleo A, em *átomos/barn-cm*.

<b>Nuclídeo</b>	<b>FA01</b>	<b>FA02</b>	<b>FA03</b>
<sup>234</sup> U	1,29281E-06	1,69963E-06	2,16059E-06
<sup>235</sup> U	1,27193E-04	1,78814E-04	2,12344E-04
<sup>238</sup> U	6,45765E-03	6,38541E-03	6,34319E-03
H <sub>2</sub> O	1,37341E-02	1,37341E-02	1,37341E-02
<sup>10</sup> B	5,08100E-06	5,08100E-06	5,08100E-06

Tabela 6.13: Intervalos de queima para o núcleo A.

<b>Número de intervalos de queima</b>	<b><math>\Delta t_\ell</math> (dias)</b>
2	3
1	9
5	15

Conforme o núcleo do reator do projeto MYRRHA (ABDERRAHIM *et al.*, 2007), o núcleo A possui um fator de multiplicação efetivo ( $k_{\text{eff}}$ ) inicial de 0,95. Nesta

configuração, o  $k_{\text{eff}}$  decresce cerca de 1000 pcm (ABDERRAHIM *et al.*, 2005), partindo de 0,95 no início do ciclo de queima (BOC) para 0,94 no final do ciclo de queima (EOC), conforme mostrado na Figura 6.5. Esse comportamento é observado nos dois testes realizados. O  $k_{\text{eff}}$  obtido apresenta boa concordância para ambas as metodologias de cálculo, sendo a maior diferença percentual de 0,01% para o instante  $t_{\ell} = 15$  dias.

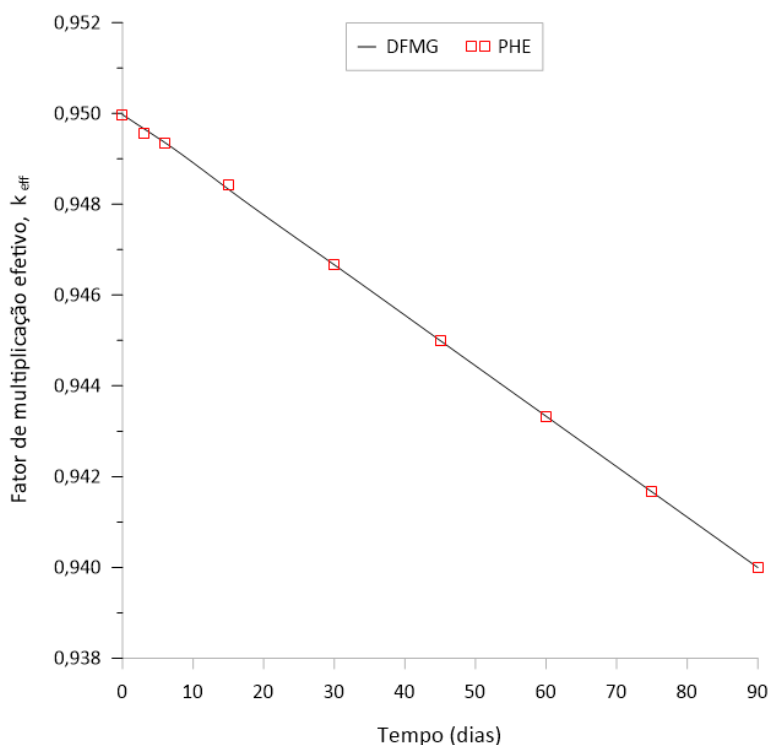


Figura 6.5: Comportamento do  $k_{\text{eff}}$  ao longo do tempo, núcleo A.

Para o Teste 1, a intensidade da fonte externa de nêutrons é mantida fixa em  $1,37\text{E}+17$  nêutrons/s, enquanto a potência de operação do sistema decresce de 45 para 34,5 MW, conforme apresentado na Figura 6.6. O comportamento da potência de operação do sistema é similar ao observado em HAECK *et al.*, (2006). No Teste 2, a potência de operação do sistema é mantida fixa em 45 MW, fazendo com que a intensidade da fonte externa de nêutrons aumente de  $1,37\text{E}+17$  para  $1,80\text{E}+17$  nêutrons/s, conforme pode ser observado na Figura 6.7.

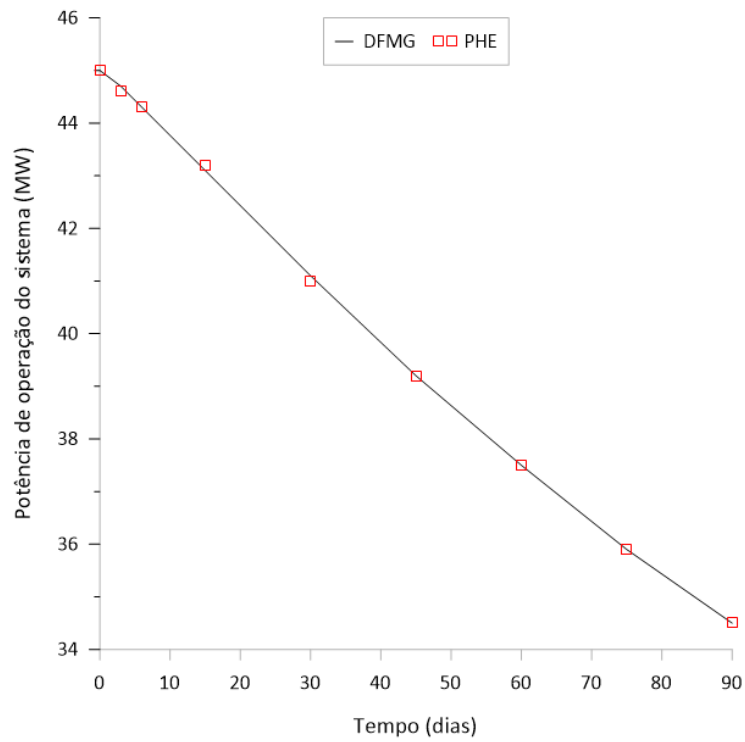


Figura 6.6: Comportamento da potência de operação do sistema para a intensidade da fonte externa de nêutrons fixa ao longo do tempo, núcleo A.

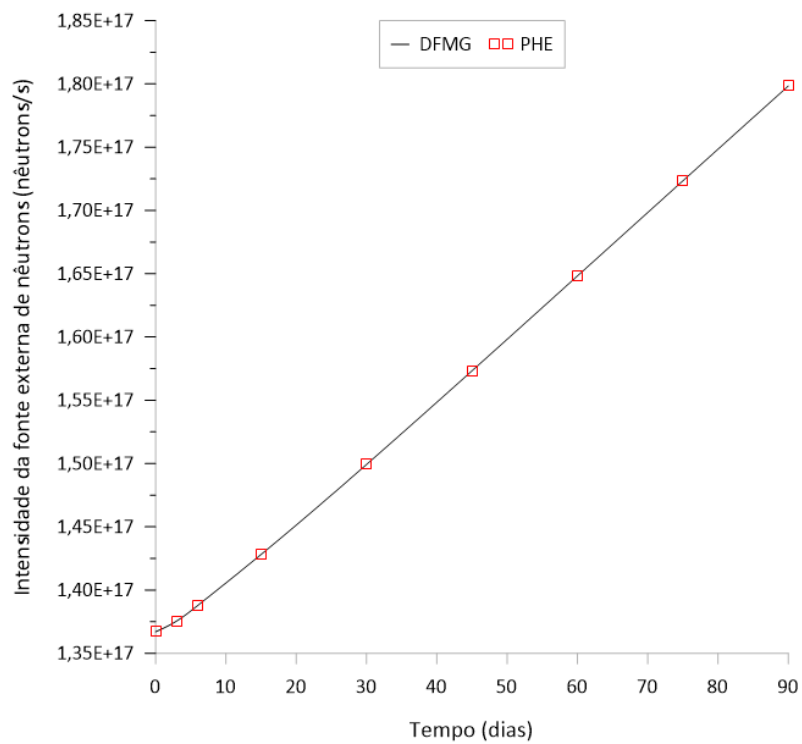


Figura 6.7: Comportamento da intensidade da fonte externa de nêutrons para a potência de operação do sistema fixa ao longo do tempo, núcleo A.

Conforme observado nas Figuras 6.5 a 6.7, ambas metodologias produzem resultados similares. O maior desvio relativo calculado entre o método de depleção com DFMG e PHE pode ser visto nas Figuras 6.5 e 6.6 para o instante  $t_\rho = 15$  dias, na qual obteve-se 0,24% e 0,25%, para os Testes 1 e 2, respectivamente.

O fator de multiplicação efetivo decresce com o tempo, fazendo com que a potência do reator também decaia, conforme mostrado nas Figuras 6.5 e 6.6. Esse comportamento é esperado, devido à produção de actínídeos e produtos de fissão. Para compensar esse decaimento e manter a potência de operação do sistema constante, se faz necessário aumentar a intensidade da fonte externa de nêutrons, conforme pode ser visto na Figura 6.7. Geralmente, este é o comportamento observado em operações de reatores do tipo ADS, na qual a intensidade da fonte externa de nêutrons deve ser ajustada de acordo com a variação do  $k_{\text{eff}}$  para manter a potência predefinida do núcleo (TSUJIMOTO *et al.*, 2004). Apesar disto, os resultados de ambos os testes serão apresentados.

As Figuras 6.8 e 6.9 apresentam, para os Testes 1 e 2, respectivamente, o desvio relativo entre as concentrações isotópicas no final do ciclo de queima (EOC) calculado em ambas metodologias desenvolvidas, para os três elementos combustíveis presentes no núcleo A. O maior desvio relativo para o Teste 1 foi de 0,19% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$ , enquanto que para o Teste 2 foi de 0,09% para o nuclídeo  $^{239}\text{Pu}$ . Mas, esses desvios variam ao longo do ciclo de queima. As Figuras 6.10 a 6.15 e as Figuras 6.16 a 6.21 apresentam os maiores e menores desvios relativos nas concentrações isotópicas calculados para os Testes 1 e 2, respectivamente. Entretanto, o maior desvio relativo encontrado em ambos os testes e ao longo dos ciclos de queima foi de 0,76% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$ , o qual se encontra no final da cadeia de depleção e apresentou concentração isotópica na ordem de  $E-17$  átomos/barn·cm no instante de queima que este valor foi calculado.

Os resultados obtidos pela metodologia de cálculo de depleção que utiliza o PHE apresentaram ótima concordância com os obtidos com o DFMG. Estes resultados estão associados com a acurácia na qual o fluxo médio de nêutron é calculado. Portanto, de acordo com a Equação (2.33), a distribuição das densidades de potência para cada elemento combustível é mostrada na Figura 6.22, para uma simetria de 1/4 de núcleo, e em  $t_\rho = 15$  dias, que representa a maior diferença percentual ao longo do ciclo de

queima. A maior diferença percentual na distribuição da densidade de potência é de apenas 0,02%.

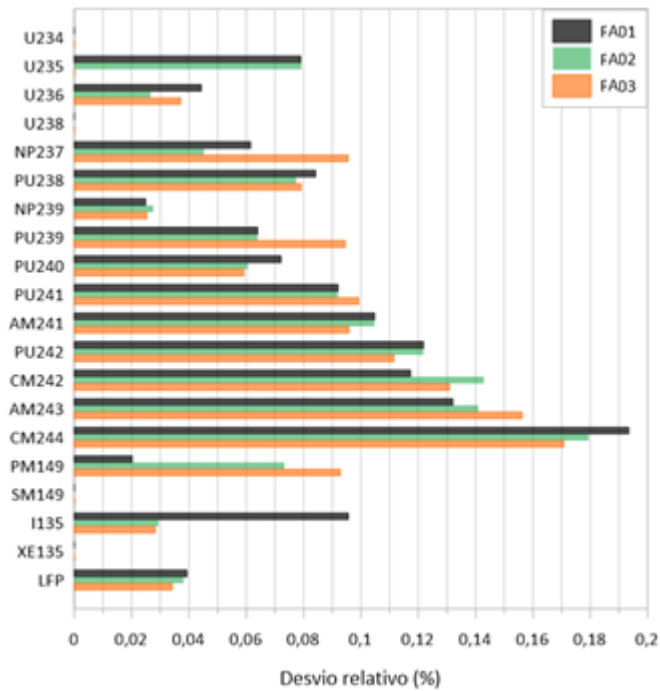


Figura 6.8: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo A, para a condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante.

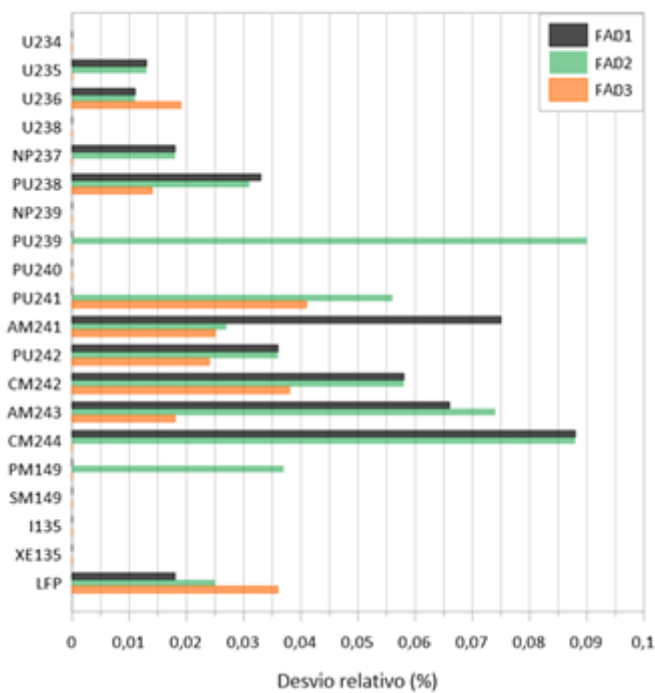


Figura 6.9: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo A, para a condição de potência de operação do sistema constante.

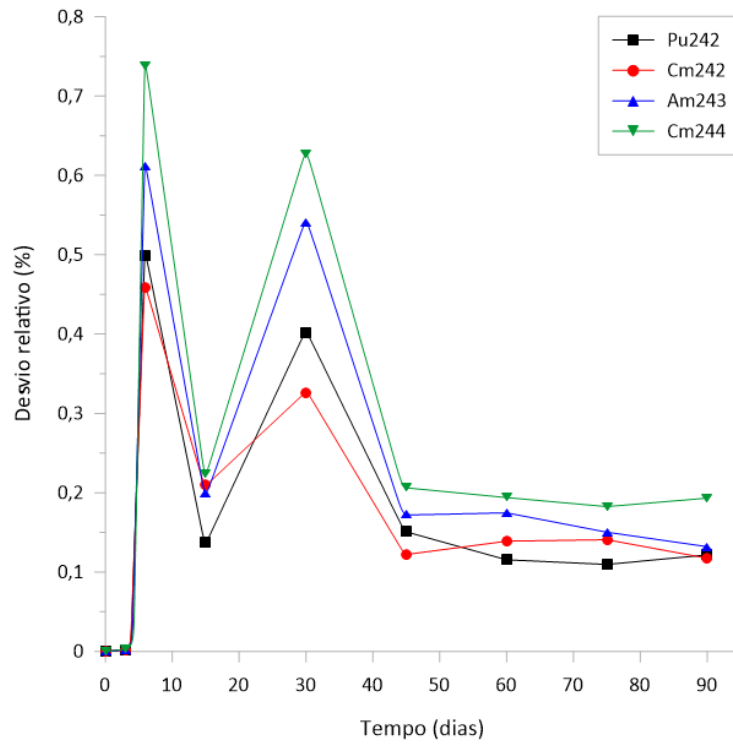


Figura 6.10: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.

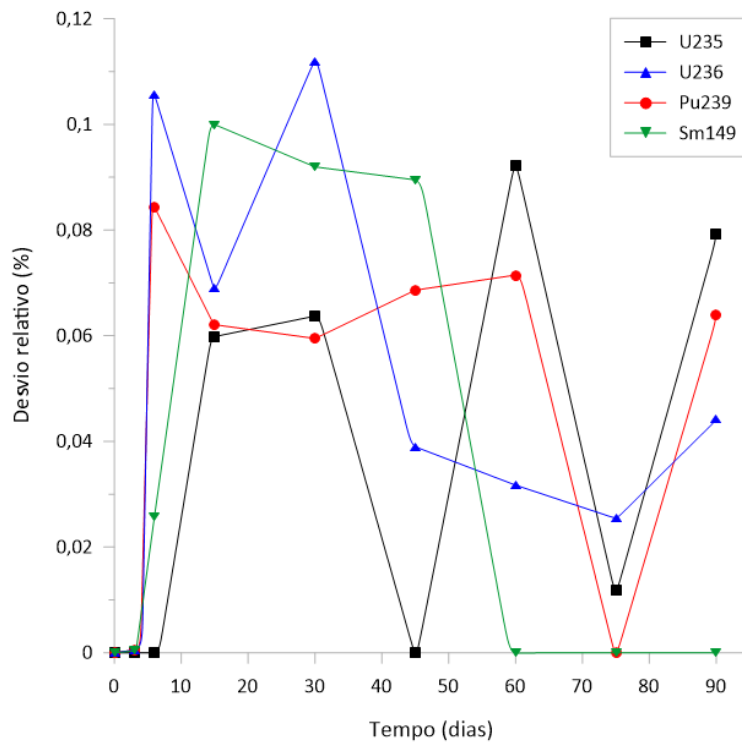


Figura 6.11: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.



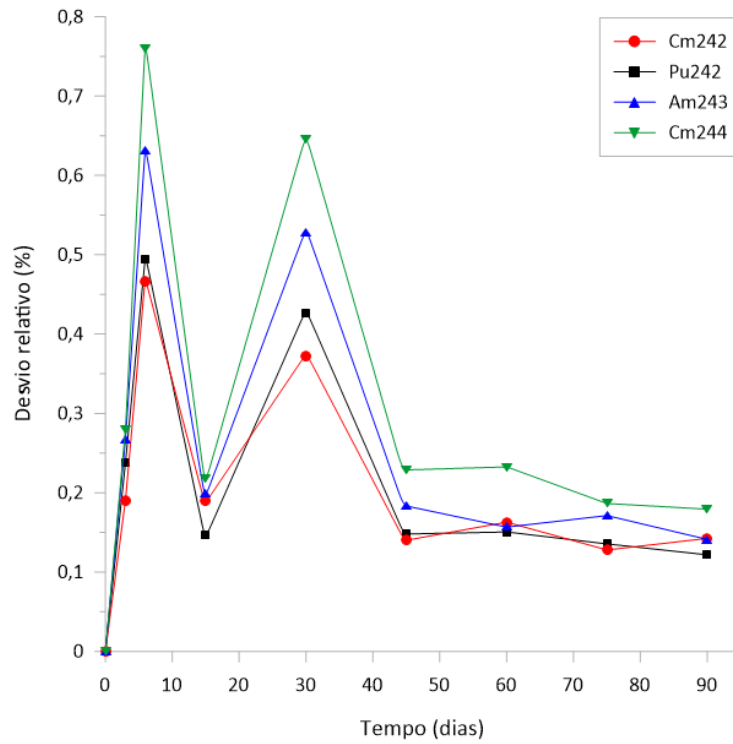


Figura 6.12: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.

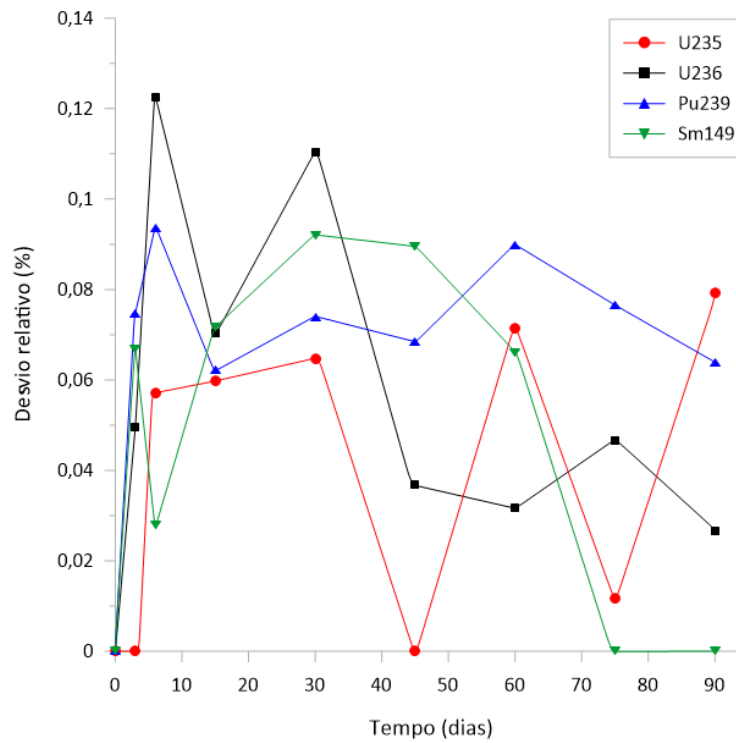


Figura 6.13: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.

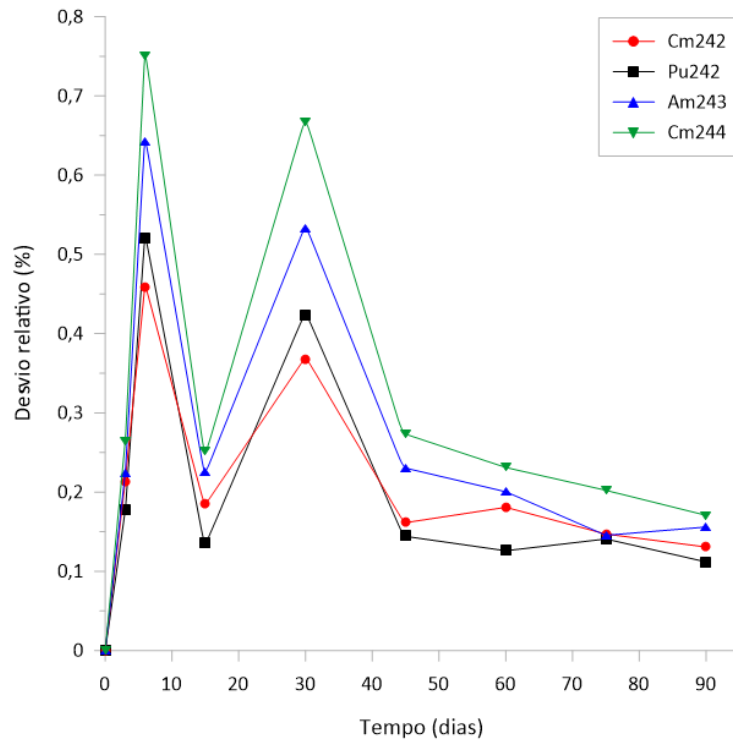


Figura 6.14: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.

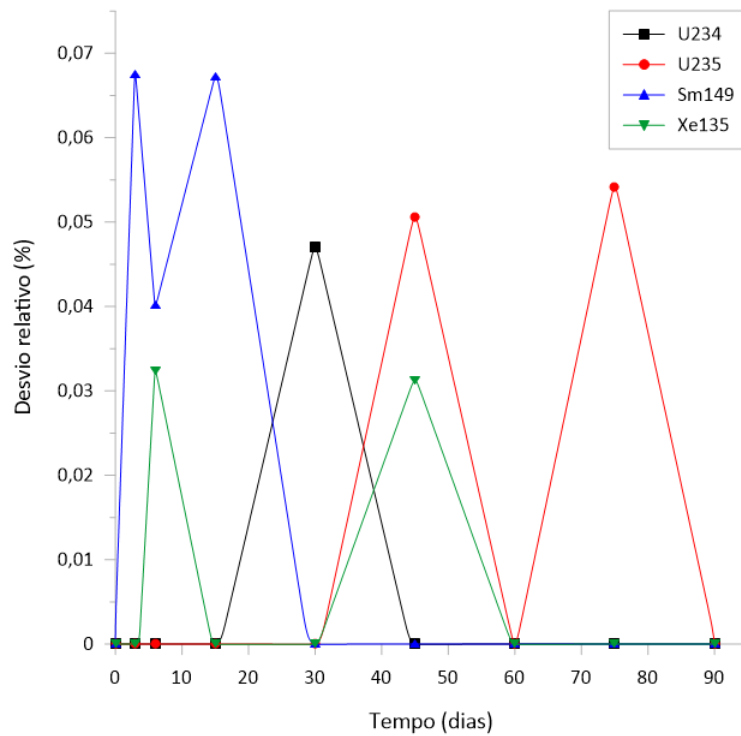


Figura 6.15: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo A.

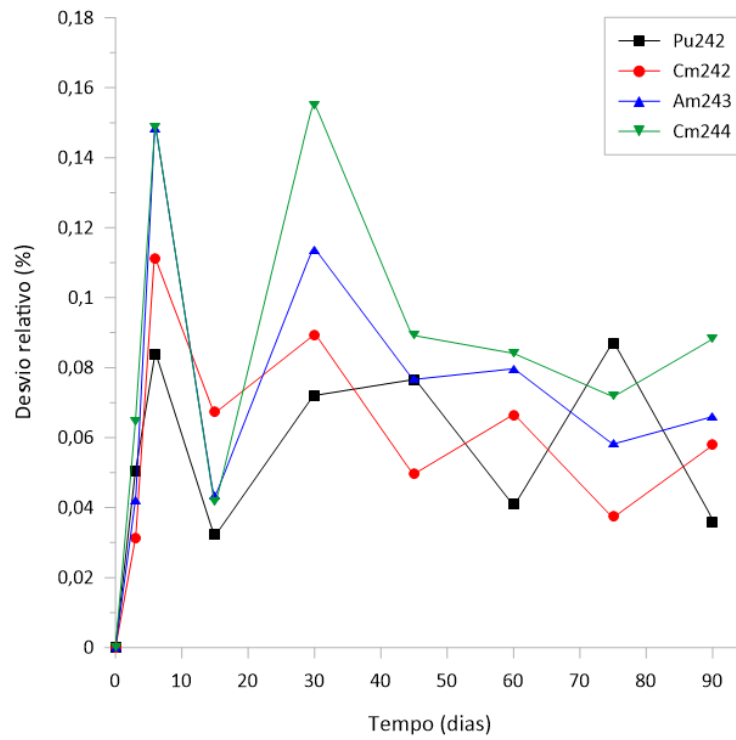


Figura 6.16: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.

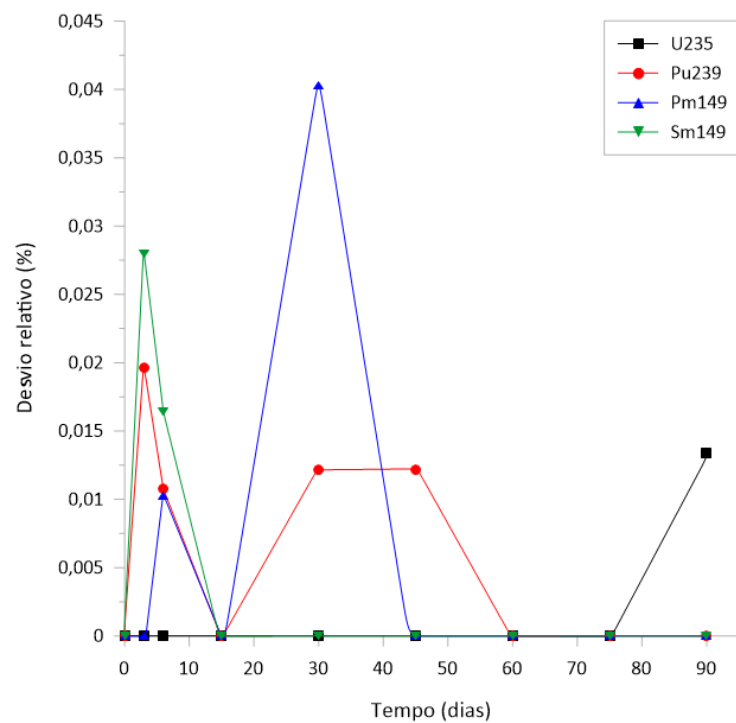


Figura 6.17: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.

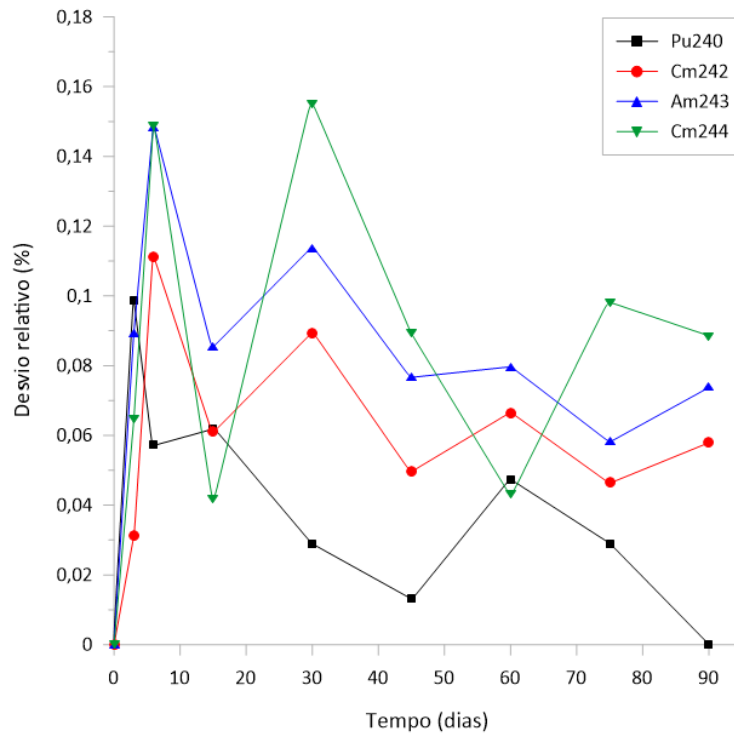


Figura 6.18: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.

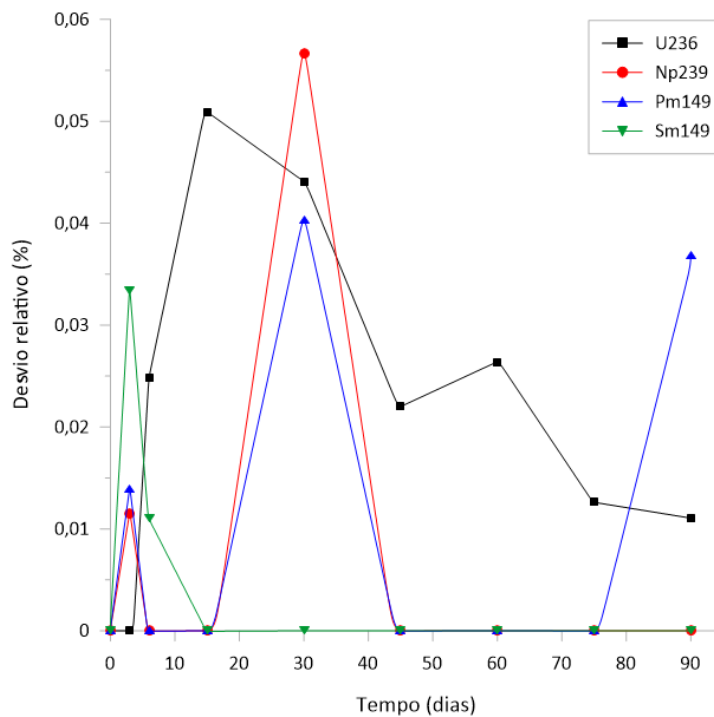


Figura 6.19: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA02, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.

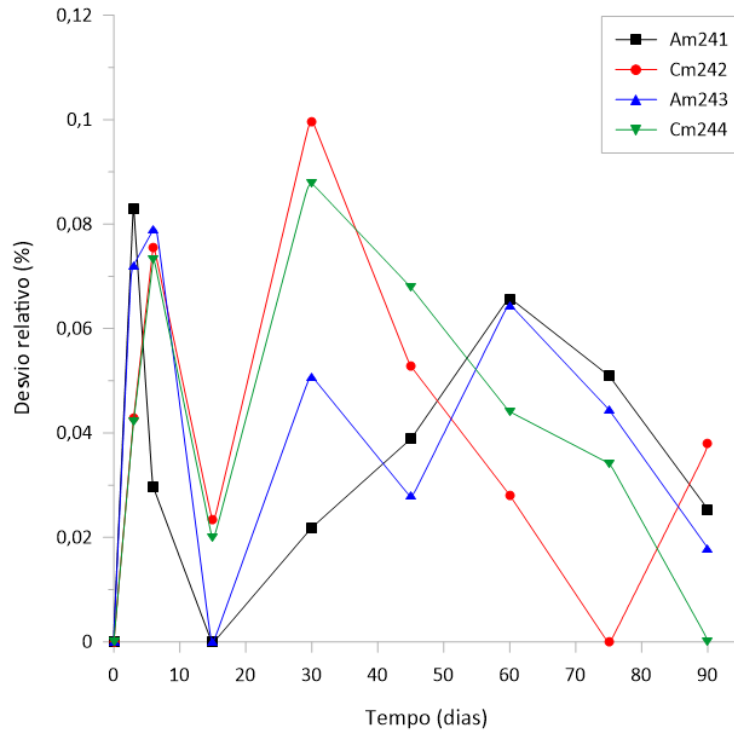


Figura 6.20: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.

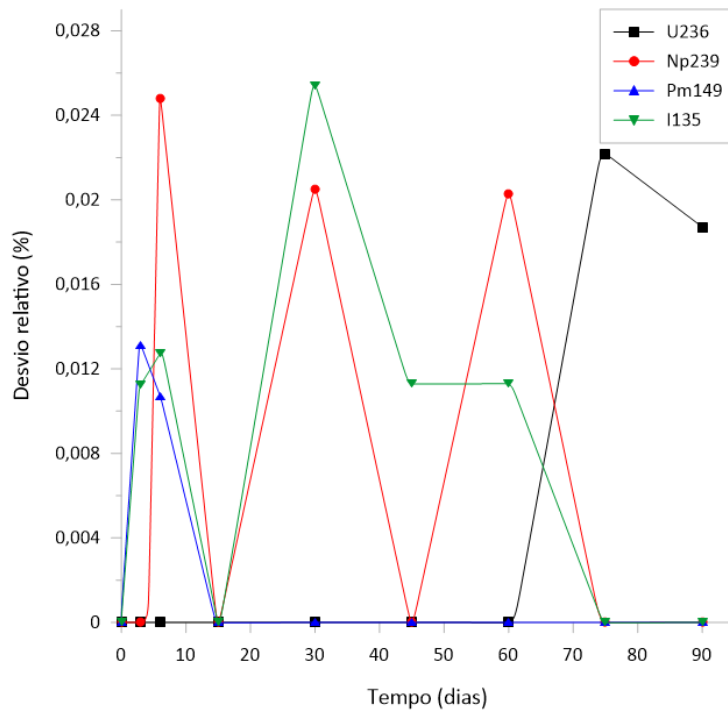


Figura 6.21: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA03, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo A.

141,88 141,90 0,014 %	132,32 132,34 0,015 %	117,75 117,78 0,025 %		DFMG PHE Desvio
153,55 153,56 0,007 %	179,5 179,52 0,011 %	122,63 122,65 0,016 %	126,69 126,72 0,024 %	
259,31 259,28 0,012 %	193,04 193,03 0,005 %	202,39 202,4 0,005 %	122,63 122,65 0,016 %	117,75 117,78 0,025 %
262,93 262,81 0,046 %	292,46 292,38 0,027 %	193,04 193,03 0,005 %	179,5 179,52 0,011%	132,32 132,34 0,015 %
	262,93 262,81 0,046 %	259,31 259,28 0,012 %	153,55 153,56 0,007 %	141,87 141,9 0,021 %

Figura 6.22: Distribuição de potência do núcleo A em  $t_\ell = 15$  dias, em  $W/cm^3$ .

## 6.4 Resultados para o Núcleo B

As concentrações iniciais dos nuclídeos presentes nos dois elementos combustíveis do núcleo B são disponibilizadas na Tabela 6.14. A duração do ciclo de queima considerados nestes cálculos foi de 300 dias (SUGAWARA *et al.*, 2016), na qual foi dividido em 23 intervalos de queima ( $\Delta t_\ell \equiv t_{\ell+1} - t_\ell$ ), conforme mostrado na Tabela 6.15.

Tabela 6.14: Concentrações iniciais dos nuclídeos do núcleo B, em *átomos/barn-cm*.

Nuclídeo	FA01	FA04
$^{234}\text{U}$	1,29281E-06	2,16121E-06
$^{235}\text{U}$	2,25693E-04	2,86780E-04
$^{238}\text{U}$	6,45765E-03	6,34466E-03
$\text{H}_2\text{O}$	1,37341E-02	1,37341E-02
$^{10}\text{B}$	1,90700E-05	1,90700E-05

Tabela 6.15: Intervalos de queima para o núcleo A.

Número de intervalos de queima	$\Delta t_\ell$ (dias)
2	3
1	14
1	20
18	30
1	20

Conforme o núcleo do reator do projeto JAERI (SUGAWARA *et al.*, 2016), o núcleo B possui uma subcriticalidade inicial de 0,97, decrescendo para 0,94 no final dos 600 dias de queima, conforme apresentado na Figura 6.23. Esse comportamento é observado para ambos os testes realizados. A partir Figura 6.23, observa-se que o  $k_{\text{eff}}$  obtido na metodologia que utiliza o PHE apresenta boa concordância com a metodologia que utiliza o DFMG, na qual o maior desvio relativo é de 0,01% para o instante  $t_\ell = 550$  dias. O comportamento do  $k_{\text{eff}}$  para o núcleo A é o mesmo observado para o núcleo B, onde a subcriticalidade é mantida durante a operação de ambos núcleos.

No Teste 1, a intensidade da fonte externa de nêutrons é fixada em  $3,08\text{E}+17$  *nêutrons/s*, fazendo com que a potência operacional do sistema decresça de 800 para 160,4 MW, conforme mostrado na Figura 6.24. Já para o Teste 2, onde a potência operacional do sistema é mantida constante em 800 MW, a intensidade da fonte externa de nêutrons varia com um aumento de  $3,08\text{E}+17$  para  $2,65\text{E}+18$  *nêutrons/s*, conforme pode ser visto na Figura 6.25. O maior desvio relativo calculado entre as metodologias DFMG e PHE para os Testes 1 e 2 é de 0,05% e 0,18%, respectivamente.

As Figuras 6.26 e 6.27 apresentam, para os Testes 1 e 2, respectivamente, o desvio relativo entre as concentrações isotópicas no final do ciclo de queima (EOC) calculado em ambas metodologias desenvolvidas, para os dois elementos combustíveis presentes no núcleo B. O maior desvio relativo para o Teste 1 foi de 0,24% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$ , enquanto que para o Teste 2 foi de 0,20% para o nuclídeo  $^{239}\text{Np}$ . As Figuras 6.28 a 6.31 e as Figuras 6.32 a 6.35 apresentam os maiores e menores desvios relativos obtidos nas concentrações isotópicas calculados para os Testes 1 e 2, respectivamente. Contudo, o

maior desvio relativo encontrado em ambos os testes e ao longo dos ciclos de queima foi de 0,32% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$ , o qual se encontra no final da cadeia de depleção e apresentou concentração isotópica na ordem de E-18 *átomos/barn·cm* no instante de queima que este valor foi calculado.

Assim como os resultados obtidos para o núcleo A, os resultados obtidos para o núcleo B apresentaram ótima concordância em ambas às metodologias de cálculo de depleção. Sendo os mesmos também associados com a acurácia na qual o fluxo de nêutron médio foi calculado. Deste modo, de acordo com a Equação (2.33), a distribuição das densidades de potência para cada elemento combustível é mostrada na Figura 6.36, para uma simetria de 1/4 de núcleo, e em  $t_\ell = 550$  dias, que representa a maior diferença percentual ao longo do ciclo de queima. A maior diferença percentual na distribuição da densidade de potência é de apenas 0,27%.

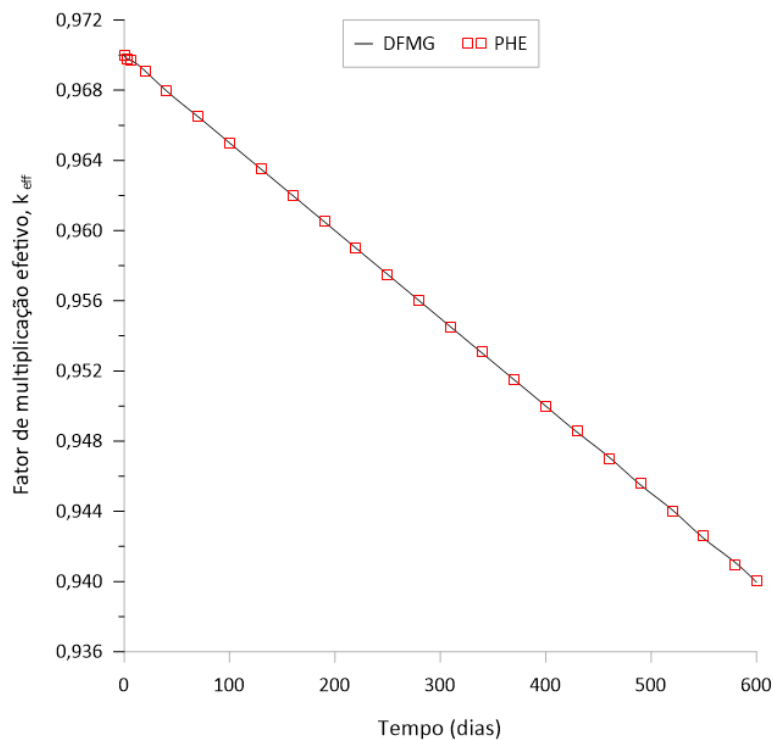


Figura 6.23: Comportamento do  $k_{\text{eff}}$  ao longo do tempo, núcleo B.



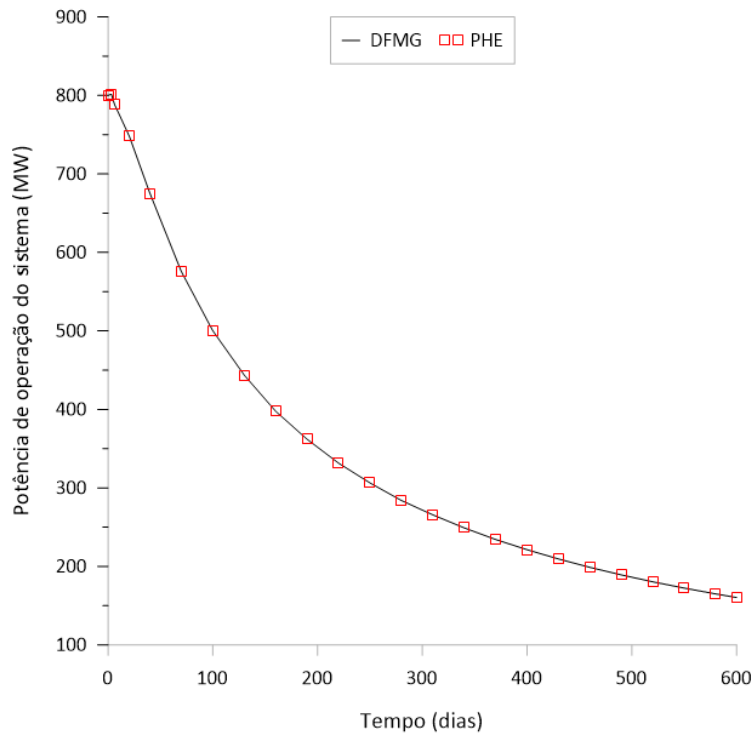


Figura 6.24: Comportamento da potência de operação do sistema para a intensidade da fonte externa de nêutrons fixa ao longo do tempo, núcleo B.

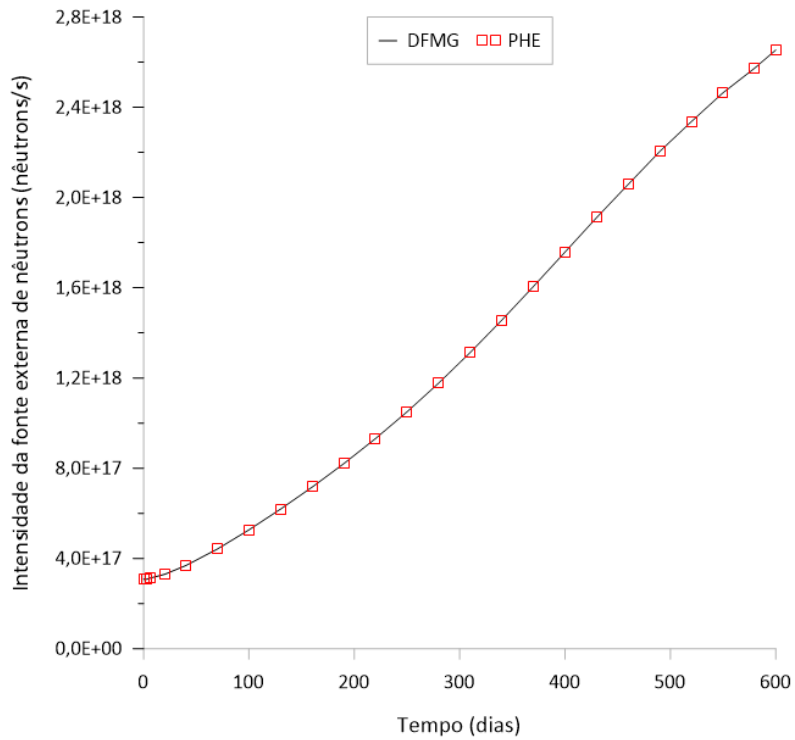


Figura 6.25: Comportamento da intensidade da fonte externa de nêutrons para a potência de operação do sistema fixa ao longo do tempo, núcleo B.

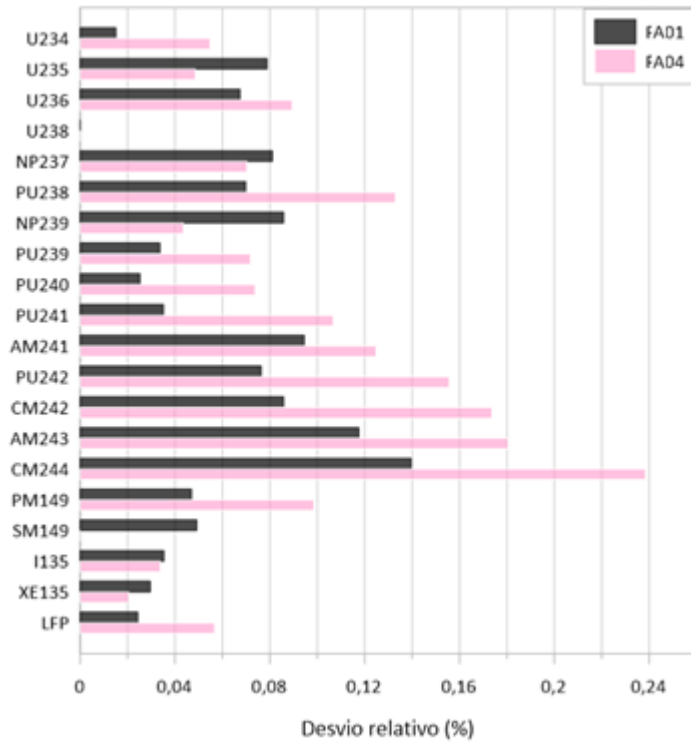


Figura 6.26: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo B, para a condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante.

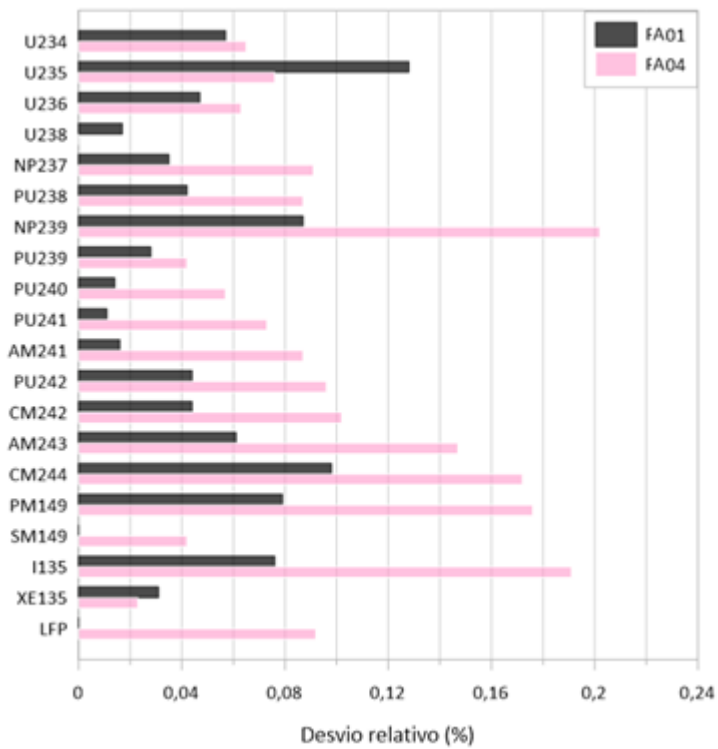


Figura 6.27: Desvios relativos nas concentrações isotópicas no EOC para o núcleo B, para a condição de potência de operação do sistema constante.

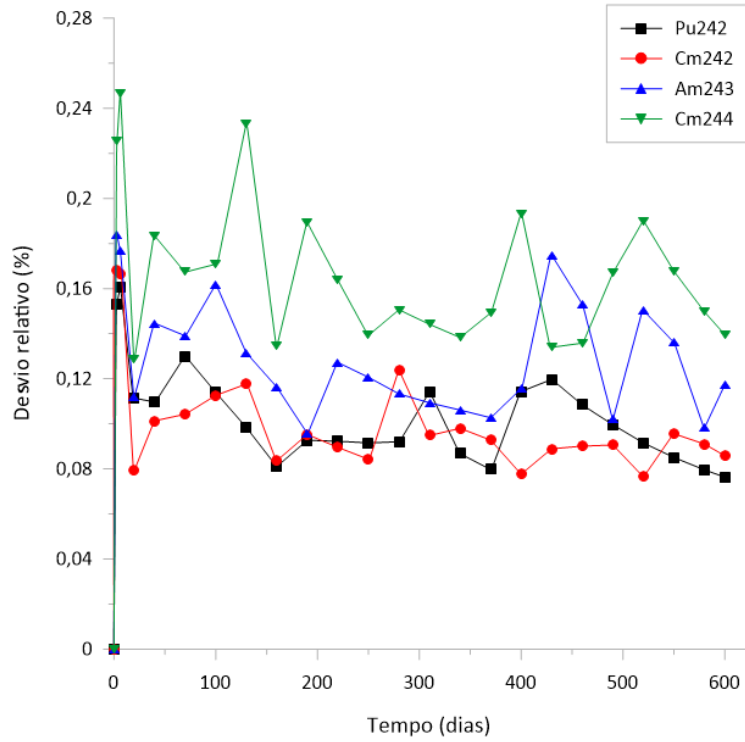


Figura 6.28: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B.

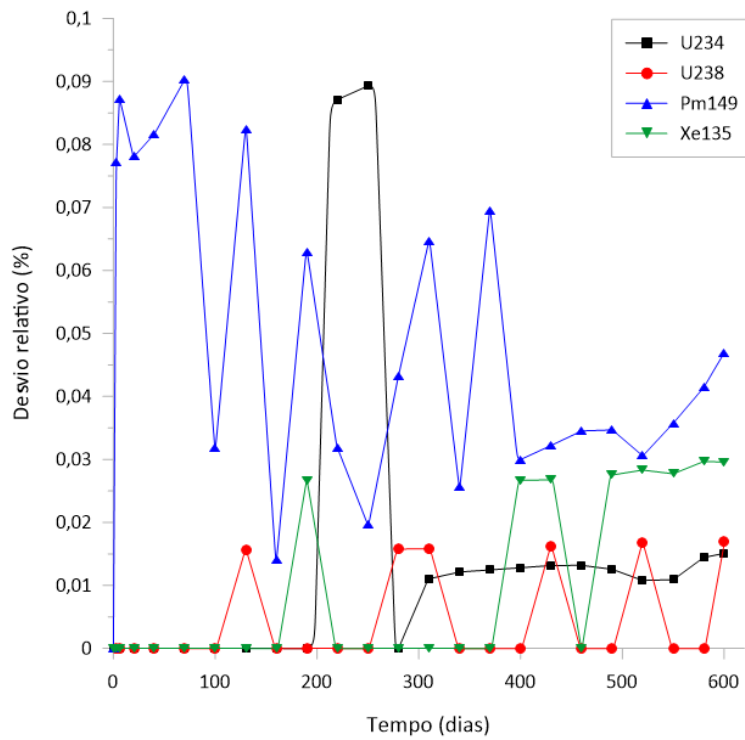


Figura 6.29: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B.

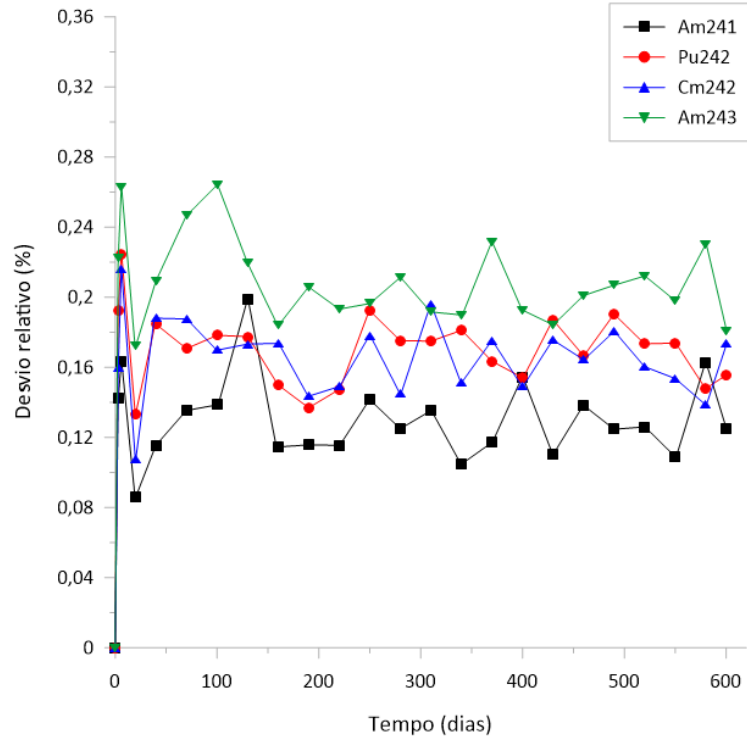


Figura 6.30: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B.

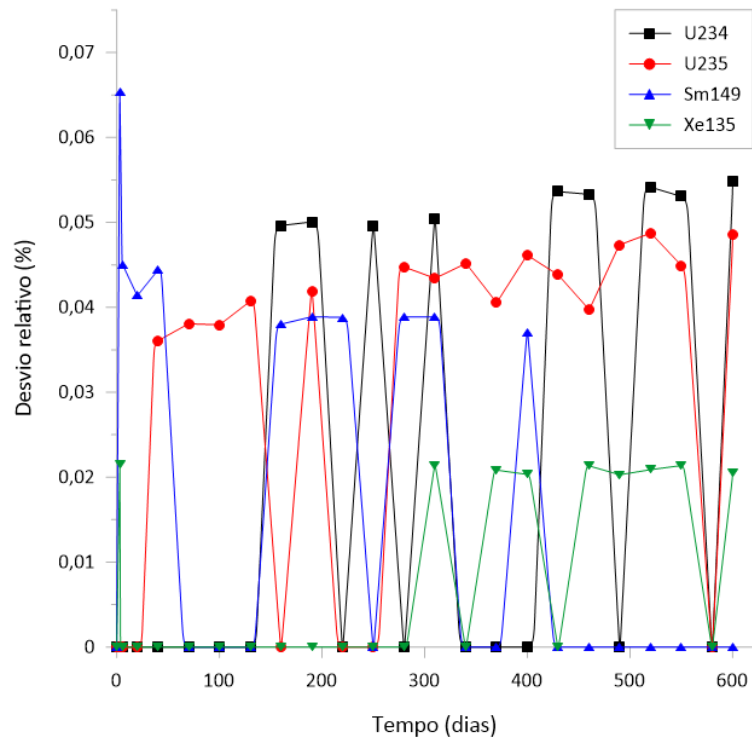


Figura 6.31: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de intensidade da fonte externa de nêutrons constante, para o núcleo B.

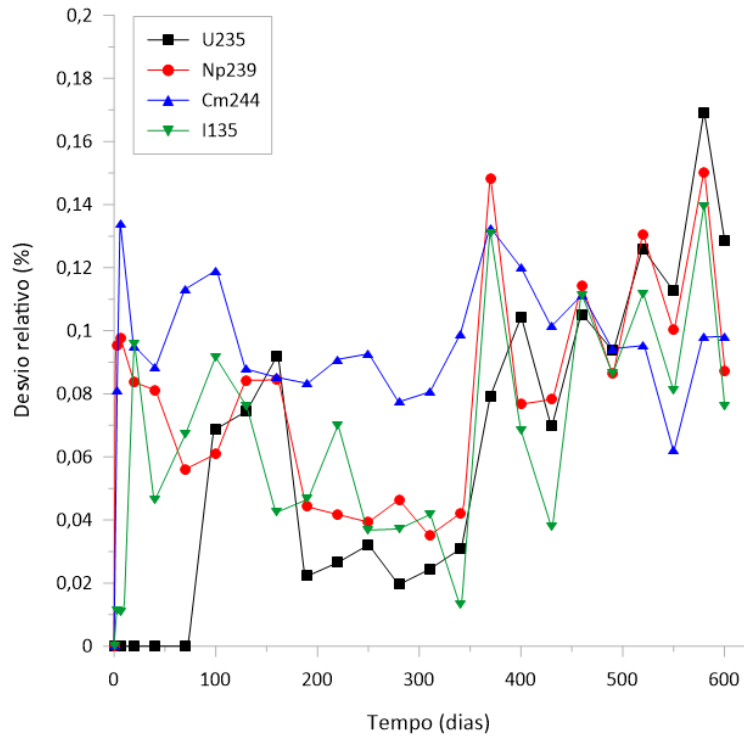


Figura 6.32: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.

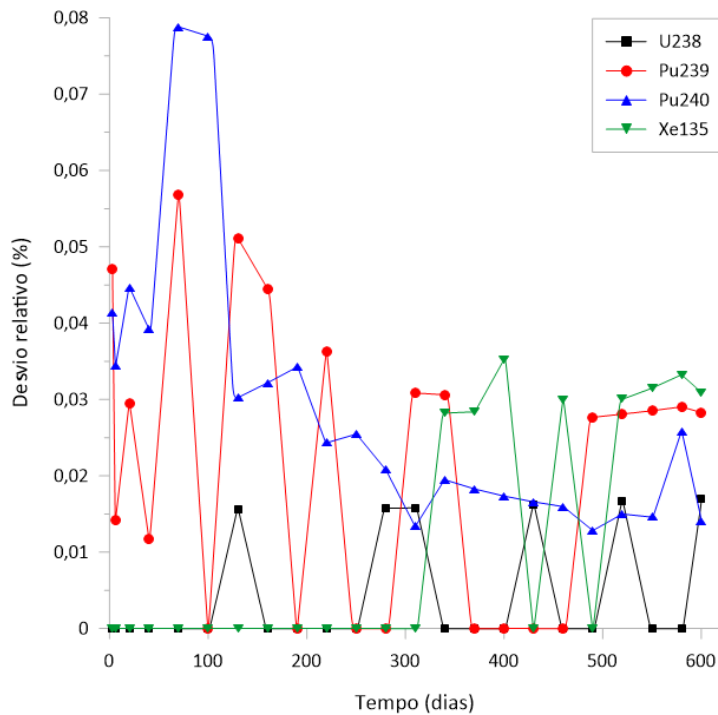


Figura 6.33: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA01, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.

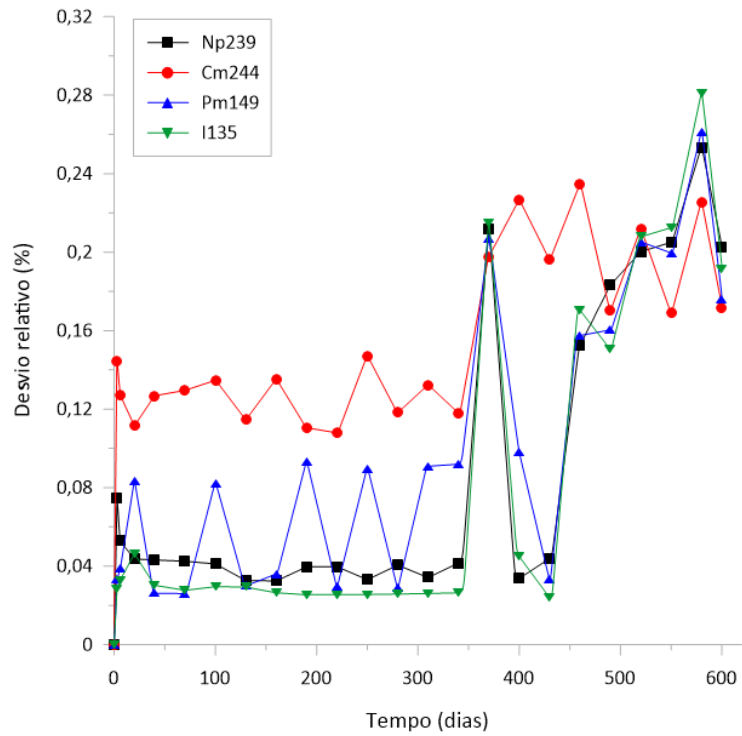


Figura 6.34: Maiores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.

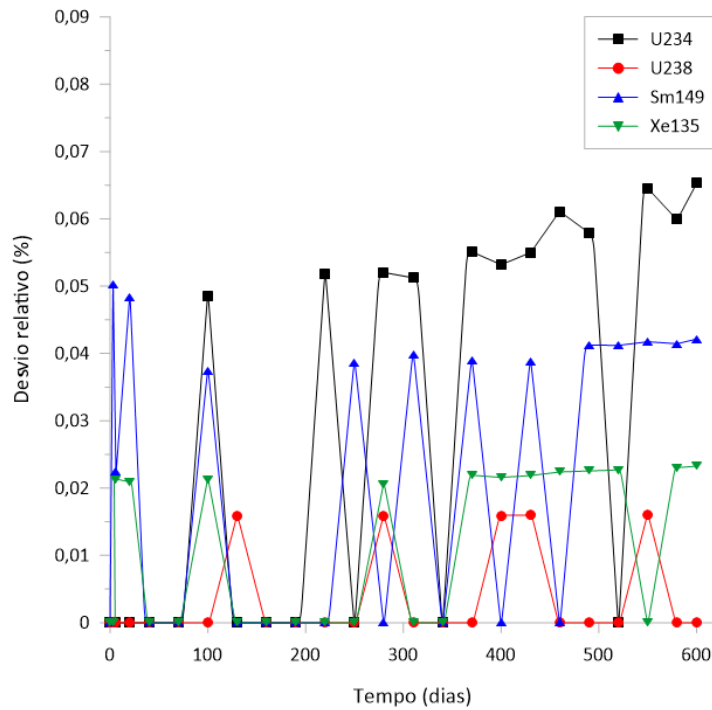


Figura 6.35: Menores desvios relativos calculados para alguns nuclídeos do FA04, na condição de potência de operação do sistema constante, para o núcleo B.

63,98 64,09 0,172 %	63,59 63,71 0,189 %	62,11 62,24 0,209 %	58,04 58,18 0,241 %	48,2 48,33 0,270 %			DFMG PHE Desvio
92,41 92,52 0,119 %	91,45 91,57 0,131 %	88,25 88,39 0,159 %	81,81 81,96 0,183 %	71,36 71,52 0,224 %	55,27 55,41 0,253 %		
124,6 124,63 0,024 %	122,01 122,05 0,033 %	113,72 113,79 0,062 %	97,79 97,9 0,112 %	88,77 88,92 0,169 %	74,06 74,22 0,216 %	55,27 55,41 0,253 %	
228,22 228,07 0,066 %	219,89 219,76 0,059 %	194,95 194,86 0,046 %	139,69 139,7 0,007 %	103,66 103,76 0,096 %	88,77 88,92 0,169 %	71,36 71,52 0,224 %	48,2 48,33 0,270 %
578,24 577,53 0,123 %	544,48 543,82 0,121 %	447,42 446,92 0,112 %	239,73 239,56 0,071 %	139,69 139,7 0,007 %	97,79 97,9 0,112 %	81,8 81,96 0,196 %	58,04 58,18 0,241 %
			447,42 446,91 0,114 %	194,95 194,86 0,046 %	113,72 113,79 0,062 %	88,25 88,39 0,159 %	62,11 62,24 0,209 %
			544,48 543,82 0,121 %	219,89 219,76 0,059 %	122,01 122,05 0,033 %	91,45 91,57 0,131 %	63,59 63,71 0,189 %
			578,24 577,53 0,123 %	228,22 228,07 0,066 %	124,6 124,63 0,024 %	92,41 92,52 0,119 %	63,98 64,1 0,188 %

Figura 6.36: Distribuição de potência do núcleo B em  $t_\ell = 550$  dias, em  $W/cm^3$ .

## 6.5 Comparação entre custos computacionais

O tempo de processamento, ou o custo computacional, gasto para realização de ambas as metodologias, para o cálculo de todos os casos avaliados neste trabalho, está disponibilizado na Tabela 6.16. Todos as simulações foram executadas em um HP Pavilion, com Intel Core I5-5200U @ 2.20 GHz de processador, 8.0 GB de RAM, em um sistema operacional Windows 10. Observa-se que a metodologia de cálculo de depleção com PHE apresenta um tempo de processamento consideravelmente menor que a calculada com DFMG.

Tabela 6.16: Custo computacional gasto em cada simulação, em s.

Núcleo	Seleção de Teste	DFMG	PHE	Desvio relativo (%)
A	1	2.00	0.73	63.50
	2	1.58	0.87	44.94
B	1	27.29	7.34	73.10
	2	31.63	9.36	70.41

## 7 Conclusões

Esta tese de doutorado teve como objetivo o desenvolvimento de duas diferentes metodologias de cálculo para a obtenção do fluxo de nêutrons para a solução do problema de depleção isotópica em sistemas subcríticos guiados por uma fonte externa de nêutrons, em estrutura de malha grossa. O problema de depleção compreende na solução das equações de depleção isotópicas, assim como da equação para o fluxo de nêutrons. Em ambas metodologias, o Método de Colocação Polinomial de Jacobi foi escolhido para determinar a exponencial da matriz de depleção e, assim resolver as equações de depleção isotópica. Mas vale ressaltar que qualquer outro método poderia ser usado para resolver o sistema de equações, visto que o mesmo não tem influência nas metodologias de cálculo que são apresentadas neste trabalho.

A chamada Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com DFMG utiliza o método das Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG) para a solução do problema de fonte fixa da equação de difusão de nêutrons, onde os fluxos de nêutrons foram obtidos diretamente no início de cada intervalo de queima  $[t_\ell, t_{\ell+1})$ . Com os esses fluxos e as concentrações isotópicas conhecidas em  $t_\ell$ , foi possível determinar as concentrações isotópicas em  $t_{\ell+1}$ .

Já a chamada Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com PHE, a solução numérica da equação de difusão de nêutrons utilizando o método DFMG foi utilizada somente no primeiro intervalo de queima, ou seja, em  $t_1$ . Nos demais intervalos, os fluxos de nêutrons foram obtidos através do método de Expansão em Pseudo-Harmônicos. Conforme a metodologia anterior, os fluxos de nêutrons foram usados para resolver as equações de depleção isotópica e, assim, obter as concentrações isotópicas ao longo dos ciclos de queima.

A aplicabilidade de ambas as metodologias foi verificada através de dois sistemas subcríticos acionados por uma fonte externa de nêutrons, chamados de núcleo A e B. O núcleo A representa um reator de pequeno porte que gera 45 MW de potência e opera com um ciclo de 90 dias, enquanto que o núcleo B representa um reator de grande porte que gera 800 MW de potência e opera com um ciclo de 600 dias. Durante a operação de



ambos os reatores, o mecanismo de ajuste de subcriticalidade foi realizado para atender o  $k_{\text{eff}}^{\text{alvo}}$  definido em cada núcleo. Este ajuste foi obtido com base no fator de multiplicação efetivo, calculado a partir da solução do problema de autovalor da equação de difusão de nêutrons com o Método de Expansão Nodal (NEM).

Para ambas metodologias, dois tipos de problemas foram realizados para verificar o comportamento de ambos os núcleos ao longo de seus respectivos ciclos de queima. O Teste 1 analisou as variações da potência de operação do sistema enquanto a intensidade da fonte externa de nêutrons foi mantida constante, enquanto que o Teste 2 analisou a variação da intensidade da fonte externa de nêutrons enquanto a potência de operação do sistema foi mantida constante.

Os resultados obtidos para o núcleo A apresentaram como maiores desvios relativos, entre ambas metodologias desenvolvidas, nas concentrações isotópicas para o final do ciclo de queima (EOC) de 0,19% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$  e de 0,09% para o nuclídeo  $^{239}\text{Pu}$ , respectivamente para os Testes 1 e 2. Entretanto, o maior desvio relativo encontrado em ambos os testes e ao longo dos ciclos de queima foi de 0,76% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$ , o qual se encontra no final da cadeia de depleção e apresentou concentração isotópica na ordem de  $E-17$  átomos/barn·cm no instante de queima que este valor foi calculado. O valor de  $k_{\text{eff}}$  obtido apresentou boa concordância para ambas as metodologias de cálculo, sendo a maior diferença percentual de 0,01% para o instante  $t_{\ell} = 15$  dias. Já o maior desvio relativo calculado entre as metodologias desenvolvidas para os comportamentos da potência de operação do sistema e da intensidade da fonte externa de nêutrons foram de 0,24% e 0,25%, para os Testes 1 e 2, respectivamente. Por fim, a maior diferença percentual na distribuição da densidade de potência foi de apenas 0,02%.

Os resultados obtidos para o núcleo B apresentaram comportamento similar aos obtidos para o núcleo A. Os maiores desvios relativos para as concentrações isotópicas no final do ciclo de queima (EOC) foram de 0,24% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$  e de 0,20% para o nuclídeo  $^{239}\text{Np}$ , para o Teste 1 e 2, respectivamente. Contudo, o maior desvio relativo encontrado em ambos os testes e ao longo dos ciclos de queima foi de 0,32% para o nuclídeo  $^{244}\text{Cm}$ . O maior desvio relativo para o valor de  $k_{\text{eff}}$  obtido foi de 0,01% para o instante  $t_{\ell} = 550$  dias. Já o maior desvio relativo calculado entre as metodologias desenvolvidas para os comportamentos da potência de operação do sistema e da

intensidade da fonte externa de nêutrons foram de 0,05% e 0,18%, para os Testes 1 e 2, respectivamente. Finalmente, a maior diferença percentual na distribuição da densidade de potência foi de apenas 0,27%.

Ao final, observou-se que a metodologia de cálculo de depleção com PHE apresentou um tempo de processamento consideravelmente menor que a calculada com DFMG, atingindo a maior diferença no tempo de processamento de 73,10% para o Teste 1 no núcleo B.

Os resultados obtidos para o núcleo A e para o núcleo B apresentaram uma boa concordância em ambas metodologias de cálculo de depleção. Estes resultados estão associados com a precisão na qual o fluxo médio de nêutron foi calculado. Conforme esperado, devido à produção de actínídeos e produtos de fissão o fator de multiplicação efetivo decresceu com o tempo fazendo com que a potência do reator também decrescesse. Para compensar esse decaimento, observado em ambos os núcleos, e manter a potência de operação do sistema constante, se fez necessário aumentar a intensidade da fonte externa de nêutrons. Este comportamento é observado em simulações numéricas de reatores do tipo ADS (TSUJIMOTO *et al.*, 2004), na qual a intensidade da fonte externa de nêutrons deve ser ajustada de acordo com a variação do  $k_{eff}$  para manter a potência predefinida do núcleo.

Assim, conclui-se que ambas as metodologias desenvolvidas nesta tese de doutorado podem ser utilizadas para a obtenção das concentrações isotópicas, sendo a Metodologia de Cálculo de Depleção Isotópica com PHE apresentando uma boa precisão e um menor tempo de processamento quando comparado à que utiliza o método DFMG.

Como propostas de trabalhos futuros, seria a solução do método PHE utilizando ordens de aproximação, ao invés do cálculo iterativo. Essa proposta diminuiria ainda mais o tempo de processamento necessário para a sua solução. Outra proposta seria a utilização de combustível irradiado ou uma mistura de Th/U, com objetivo de investigar a eficiência na transmutação do combustível. Por último, seria a comparação das metodologias desenvolvidas nesta tese com métodos estocásticos, como por exemplo o Método de Monte Carlo.

## Referências Bibliográficas

- ABDERRAHIM, H. A., AOUST, T., MALAMBU, E., *et al.*, "MYRRHA, A Pb-Bi Experimental ADS: Specific Approach to Radiation Protection Aspects", **Radiation Protection Dosimetry**, v. 116, n. 1-4, pp. 433-441, 2005.
- ABDERRAHIM, H. A., D'HONDT, P., X, "MYRRHA : A European Experimental ADS for R & D Applications Status at Mid-2005 and Prospective Towards Implementation", **Journal of Nuclear Science and Technology**, n. 44:3, pp. 491-498, 2007.
- ABDERRAHIM, H. A., KUPSCHUS, P., BENOIT, P., *et al.*, "MYRRHA: A Multipurpose Accelerator Driven System for R&D – State-of-Art of the Project at Mid-2003". In: **Proceedings of International Workshop on P&T and ADS Development 2003**, SCK-CEN. Mol, Belgium, October 6-8, 2003.
- ABDERRAHIM, H. A., KUPSCHUS, P., MALAMBU, E., *et al.*, "MYRRHA: A Multipurpose Accelerator Driven System for Research & Development", **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, v. 463, n. 3, pp. 487-494, 2001.
- AIZAWA, N., IWASAKI, T., WATANABE, Y., *et al.*, "Study of Reactivity Control Method by the Application of Gadolinium Hydride to Accelerator-Driven System", **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 53, n. 2, pp. 240-249, 2016.
- ALVIM, A. C. M., SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S., "Depletion Calculation for a Nodal Reactor Physics Code". In: **Proceedings of the 18th International Conference on Nuclear Engineering**, pp. 311-316, Xi'an, China, May 17-21, 2010.
- ARAGONES, J. M., AHNERT, C., "Linear Discontinuous Finite Difference Formulation for Synthetic Coarse-Mesh Few-Group Diffusion Calculations", **Nuclear Science and Engineering**, v. 94, n. 4, pp. 309-322, 1986.
- BELLER, D. E., TUYLE, G. J. Van, BENNETT, D., "The U.S. Accelerator Transmutation of Waste Program", **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, n. 463, pp. 468-486, 2001.
- BELO, T. F., SILVA, F. C., "Two Different Methodologies for Neutron Flux Calculation for the Isotopic Depletion Problem in Subcritical Systems Driven by an external Neutron Source in a Coarse-Mesh Framework", **Annals of Nuclear Energy**, v. 169C, 108967, 2022.

- BILLEBAUD, A., BRISSOT, R., LE BRUN, C., *et al.*, "Prompt Multiplication Factor Measurements in Subcritical Systems: from MUSE Experiment to a Demonstration ADS", **Progress in Nuclear Energy**, v. 49, n. 2, pp. 142-160, 2007.
- BOWMAN, C. D., ARTHUR, E. D., LISOWSKI, P. W., *et al.*, "Nuclear Energy Generation and Waste Transmutation Using an Accelerator-Driven Intense Thermal Neutron Source", **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, v. 320, n. 1-2, pp. 336-367, 1992.
- CARLUEC, B., ANZIEU, P., "Proposal for a gas-cooled ADS demonstrator". In: **International Conference on Accelerator Driven Transmutation Techniques and Applications - ADTTA '99**, pp. 159-168, Prague, Czech Republic, 7-11 June 1999.
- CARMINATI, F., GELÈS, C., KLAPISCH, R., *et al.*, **Experimental Verification of the Concept of Energy Amplification by High Energy Induced Cascade**, In Report CERN-ISC-93-31; ISC-P-57, Geneva, 1993a.
- CARMINATI, F., KLAPISCH, R., REVOL, J. P., *et al.*, **An Energy Amplifier for Cleaner and Inexhaustible Nuclear Energy Production Driven by a Particle Beam Accelerator**, In Report CERN-AT-93-47-ET, Geneva, 1993b.
- CHIBA, G., PYEON, C. H., ROOIJEN, W. Van, *et al.*, "Nuclear Data-Induced Uncertainty Quantification of Neutronics Parameters of Accelerator-Driven System", **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 53, n. 10, pp. 1653-1661, 2016.
- CINOTTI, L., GIRAUD, B., ABDERRAHIM, H. A., "The Experimental Accelerator Driven System (XADS) Designs in the EURATOM 5th Framework Programme", **Journal of Nuclear Materials**, v. 335, n. 2 SPEC. ISS., pp. 148-155, 2004.
- CLARO, L. H., 1992, **O Método dos Pseudo-Harmônicos: Uma Nova Opção Usando Discretização Nodal**. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- DAVID, S., BILLEBAUD, A., BRANDAN, M. E., *et al.*, "Fast Subcritical Hybrid Reactors for Energy Production: Evolution of Physical Parameters and Induced Radiotoxicities", **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment**, v. 443(2-3), pp. 510-530, 2000.
- DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J., **Nuclear Reactor Analysis**. New York, John Wiley & Sons Inc., 1976.
- DULLA, S., MUND, E. H., RAVETTO, P., "The Quasi-Static Method Revisited", **Progress in Nuclear Energy**, v. 50, n. 8, pp. 908-920, 2008.

- FIELD, C. B., BARROS, V. R., DOKKEN, D. J., *et al.*, **Climate Change 2014: Impacts, Adaptation, and Vulnerability - Part A: Global and Sectoral Aspects**. Cambridge, Cambridge University Press, 2014.
- FINNEMANN, H., BENNEWITZ, F., WAGNER, M. R., "Interface Current Techniques for Multidimensional Reactor Calculations", **Atomkernenergie Kerntechnik**, v. 30, n. 2, pp. 123-128, 1977.
- FISCHER, H. D., FINNEMANN, H., "The Nodal Method-A Diverse Solver for Neutron Diffusion Problems", **Atomkernenergie Kerntechnik**, v. 39, n. 4, pp. 229-236, 1981.
- GABRIELLI, F., D'ANGELO, A., "Analyses of Operational Transients in the TRADE Experimental Program", **Nuclear Engineering and Design**, v. 239, n. 11, p. 2349-2356, 2009.
- GANDINI, A., "Implicit and Explicit Higher Order Perturbation Methods for Nuclear Reactor Analysis.", **Nuclear Science and Engineering**, v. 67, n. 3, pp. 347-355, 1978.
- GLASSTONE, S., SESONSKE, A., **Nuclear Reactor Engineering: Reactor Design Basics**. 4 ed. New York, Chapman and Hall, 1994.
- GOHAR, Y., SMITH, D. L., **YALINA Facility A Sub-Critical Accelerator-Driven System (ADS) for Nuclear-Energy Research Facility Description and an Overview of the Research Program (1997-2008)**. In: Report ANL 10/05, Argonne National Laboratory, Illinois, 2010.
- GOMIT, J. M., PLANCHARD, J., SARGENI, A., "Pseudo-Harmonics Method: Theory and Application". In: **Bulletin de la Direction des Etudes et Recherches - EDF**, France, pp. 61-66, 1985.
- GOMIT, J. M., PLANCHARD, J., SARGENI, A., **Utilisation des Harmoniques em Physique des Réacteurs: Méthode Standard et Méthode des Pseudo-Harmoniques**. In: Report HI 4345-07, Électricité de France - EDF, France, 1982.
- GULEVICH, A., CHEKUNOV, V., FOKINA, O., *et al.*, "Concept of Electron Accelerator-Driven System Based on Subcritical Cascade Reactor", **Progress in Nuclear Energy**, v. 50, n. 2-6, pp. 347-352, 2008.
- HAECK, W., ABDERRAHIM, H. A., WAGEMANS, C., "Keff and Ks Burn-up Swing Compensation in MYRRHA". In: **Utilization and Reliability of High-Power Proton Accelerators Workshop Proceedings**, Republic of Korea, May 16-19 2006.
- HEIMLICH, A., SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S., "Fast and Accurate GPU PWR Depletion Calculation", **Annals of Nuclear Energy**, v. 117, pp. 165-174, 2018.

- HEIMLICH, A., SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S., "Parallel GPU Implementation of PWR Reactor Burnup", **Annals of Nuclear Energy**, v. 91, pp. 135–141, 2016.
- IAEA, **Thorium Fuel Cycle - Potential Benefits and Challenges**. IAEA TECDOC No. 1450, Vienna, pp. 112, 2005.
- IAEA, **Climate Change and Nuclear Power 2020**. In: Report 978-92-0-115020-2, International Atomic Energy Agency, Vienna, pp. 110, 2020a.
- IAEA., **Energy, Electricity and Nuclear Power Estimates for the Period up to 2050, 2020 Edition**. In: Report 978-92-0-118120-6, International Atomic Energy Agency, Vienna, 2020b.
- IEA, **Global Energy and CO<sub>2</sub>: Status Report 2019**. International Agency Energy, OECD Publishing, Paris, pp. 29, 2020. Disponível em: <<https://www.iea.org/reports/global-energy-co2-status-report-2019>>. Acesso em: 11 ago. 2021.
- IEA, **World Energy Statistics and Balances**. In Report: 16834240, International Agency Energy, OECD Publishing, Paris, 2019a. Disponível em: <[https://www.oecd-ilibrary.org/energy/data/iea-world-energy-statistics-and-balances\\_enestats-data-en](https://www.oecd-ilibrary.org/energy/data/iea-world-energy-statistics-and-balances_enestats-data-en)>. Acesso em 13 ago. 2021.
- IEA, **Nuclear Power in a Clean Energy System**. International Agency Energy, OECD Publishing, Paris, pp. 113, 2019b. Disponível em: <<https://www.iea.org/reports/nuclear-power-in-a-clean-energy-system>>. Acesso em: 17 ago. 2021.
- IEA, **World Energy Outlook 2019**. International Agency Energy, OECD Publishing, Paris, pp. 810, 2019c. Disponível em: <<https://www.iea.org/reports/world-energy-outlook-2019>>. Acesso em: 17 ago. 2021.
- ISMAIL, LIEN, P. H., TAKAKI, N., *et al.*, "Performance of Natural Uranium-and-Thorium-Fueled Fast Breeder Reactors (FBRs) for <sup>233</sup>U Fissile Production", **Progress in Nuclear Energy**, v. 50(2-6), pp. 290-294, 2008.
- LAMARSH, J. R., **Introduction to Nuclear Reactor Theory**. 3 ed. Cambridge, Addison-Wesley Publishing Company, 1966.
- LAWRENCE, E. O., MCMILLAN, E. M., ALVAREZ, L. W., **Electronuclear Reator**. In Report 2933442, U.S. Atomic Energy Commission, U.S. Department of Energy, United States, 1960.
- LIMA, Z R de, SILVA, F. C., ALVIM, A. C. M., "Solution of the Fixed Source Neutron Diffusion Equation by Using the Pseudo-Harmonics Method", **Annals of Nuclear Energy**, v. 31, pp. 1649–1666, 2004.
- LIMA, Z. R. De, SILVA, F. C., ALVIM, A. C. M., "Use of Pseudo-Harmonics Method Coupled with Finite Differences Coarse Mesh in the Solution of Fixed Source Problems", **Annals of Nuclear Energy**, v. 32(12), pp. 1366–1376, 2005.

- LIMA, Z. R. de., 2005, **Aplicação do Método dos Pseudo-Harmônicos à Cinética Multidimensional**. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- MAIORINO, J. R., PEREIRA, S. A., SILVA, A. T., *et al.*, "New Proposal for the Fast Energy Amplifier", **Radiation Physics and Chemistry**, v. 61, n. 3–6, pp. 789790, 2001.
- MASSON-DELMOTTE, V., PÖRTNER, H.-O., ZHAI, P., *et al.*, **Global Warming of 1.5°C: An IPCC Special Report on the Impacts of Global Warming of 1.5°C Above Pre-industrial Levels and Related Global Greenhouse Gas Emission Pathways, in the Context of Strengthening the Global Response to the Threat of Climate Change**. In: Intergovernmental Panel on Climate Change - IPCC, Geneva, pp. 630, 2018.
- NAKAMURA, S., **Computational Methods in Engineering and Science, with Applications to Fluid Dynamics and Nuclear Systems**. 1 ed., New York, John Wiley & Sons Inc, pp.472, 1977.
- NISHIHARA, K., IWANAGA, K., TSUJIMOTO K., *et al.*, "Neutronics Design of Accelerator-Driven System for Power Flattening and Beam Current Reduction", **Journal of Nuclear Science and Technology**, 45 (8), 812–822, 2008.
- NUMERICS, V., **IMSL Fortran Numerical Library: User's Guide - Math Library**. USA, Rogue Wave Software Company, pp. 2115, 2010.
- PEREIRA, S. A., 2002, **Um Conceito Alternativo de um Reator Híbrido: Conjunto Sub-crítico Acoplado com Acelerador**. Tese de D.Sc., Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN, São Paulo, SP, Brasil.
- PEREIRA, V., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C., "Formulação de Diferenças Finitas de Malha Grossa para Cálculo do Fluxo Adjunto Matemático". In: **Proceedings of the XIII ENFIR - National Meeting of Reactor Physics and Thermal Hydraulics**, Rio de Janeiro, 11-16 Aug 2002.
- PRATA, F. S., SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S., "Solution of the Isotopic Depletion Equations Using Decomposition Method and Analytical Solutions", **Progress in Nuclear Energy**, v. 69, pp. 53–58, 2013.
- RUBBIA, C., BUONO, S., KADI, Y., *et al.*, **Fast Neutron Incineration in the Energy Amplifier As Alternative To Geologic Storage : The Case of Spain**. In Report CERN/LHC/97-01(EET), European Organization for Nuclear Research, Geneva, 1997.
- SHEFFIELD, R. L., "Increasing the Acceptance of Spent Nuclear Fuel Disposal by the Transmutation of Minor Actinides Using an Accelerator ". In: **Proceedings of the American Physical Society - APS April Meeting 2010**, Washington, DC, pp. 26, 13-16 Feb 2010.

- SILVA, F. C., WAINTRAUB, S., THOMÉ, Z. D., *et al.*, "The Pseudo-Harmonics Perturbation Method: Application to a PWR.", **Annals of Nuclear Energy**, v. 14, n. 2, pp. 99–106, 1987.
- SILVA, A. C., SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S., "Prediction of the Neutrons Subcritical Multiplication Using the Diffusion Hybrid Equation with External Neutron Sources", **Annals of Nuclear Energy**, v. 38, n. 7, pp. 1667–1675, 2011.
- SILVA, A. C., 2011, **Simulação da Multiplicação Subcrítica de Nêutrons Através da Solução da Equação Híbrida da Difusão com Fontes Externas de Nêutrons**. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- SILVA, F. C., ALVIM, A. C. M., MARTINEZ, A. S., "An Alternative Nodal Expansion Method Without Inner Iteration". In **Proceedings of the PHYSOR 2010: Advances in Reactor Physics to Power Renaissance**, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, on CD-Rom, 9-14 May 2010.
- SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S., "Aceleração do Método Nodal NEM Usando Diferenças Finitas de Malha Grossa". In: **Proceedings of the VI Encontro de Modelagem Computacional**, Nova Friburgo, RJ, Brasil, 1-3 Dec 2003.
- STACEY, W. M., **Nuclear Reactor Physics**. 2 ed. Weinheim, Wiley-VHC Verlag GmbH & Co, 2007.
- SUGAWARA, T., NISHIHARA, K., IWAMOTO, H., *et al.*, "Development of Three-Dimensional Reactor Analysis Code System for Accelerator-Driven System, ADS3D and its Application with Subcriticality Adjustment Mechanism", **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 53, n. 12, pp. 2018–2027, 2016.
- TAIPE, P. K., SILVA, F. C., ALVIN, A. C. M., "Isotopic Depletion Calculation with Generalized Perturbation Theory in Subcritical Systems Driven by an External Neutron Source", **Progress of Nuclear Energy**, v. 124, 103343, 2020.
- TSUJIMOTO, K., SASA, T., NISHIHARA, K., *et al.*, "Neutronics Design for Lead-Bismuth Cooled Accelerator-Driven System for Transmutation of Minor Actinide", **Journal of Nuclear Science and Technology**, v. 41, n. 1, pp. 21–36, 2004.
- WASCHSPRESS, E. L., **Iterative Solution of Elliptic Systems and Applications to the Neutron Diffusion Equations of Reactor Physics**. 1 ed. New Jersey, Prentice-Hall, 1966.