



SIMULAÇÃO DE UM REATOR SUBCRÍTICO TIPO ADS VIA MONTE CARLO PARA VALIDAÇÃO DE CÁLCULO DA REATIVIDADE

Mauricio Quelhas Antolin

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.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez

Fernando Carvalho da Silva

Rio de Janeiro
Fevereiro de 2013

SIMULAÇÃO DE UM REATOR SUBCRÍTICO TIPO ADS VIA MONTE CARLO PARA
VALIDAÇÃO DE CÁLCULO DA REATIVIDADE

Mauricio Quelhas Antolin

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

Examinada por:

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

Dr. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc.

Prof. Alessandro Gonçalves, D.Sc.

Dr. Antonio Carlos Abreu Mól, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
FEVEREIRO DE 2013

Antolin, Mauricio Quelhas

Simulação de um Reator Subcrítico Tipo ADS Via Monte Carlo para Validação de Cálculo da Reatividade/
Mauricio Quelhas Antolin – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XI , 97 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez,
Fernando Carvalho da Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 94 - 97.

1. Cálculo da Reatividade. 2. Reatores ADS. 3. Simulação Monte Carlo. I. Martinez, Aquilino Senra et al. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

Dedicatória

Este trabalho é dedicado a todas as pessoas que me ajudaram em toda minha caminhada acadêmica em especial à minha amada esposa Gisele, a minha filha que mesmo sem ainda nascer já é muito amada, aos meus pais e amigos que me apoiaram até aqui.

Agradecimentos

Agradeço aos meus professores Aquilino Senra Martinez e Fernando Carvalho da Silva pela dedicação e ajuda no desenvolvimento deste trabalho e também ao amigo Daniel Artur Pinheiro Palma, pelas suas contribuições neste trabalho.

Também agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

Aos amigos do LMP pelo o apoio na elaboração deste trabalho.

Ao meu pai, Manuel Angel Antolin Garcia por me incentivar a ingressar na carreira acadêmica e por todo o seu carinho.

À minha mãe, Iliana de Carvalho Quelhas pela a paciência, amor, carinho e apoio em toda minha caminhada acadêmica e pessoal.

À minha esposa pela paciência e compreensão.

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

SIMULAÇÃO DE UM REATOR SUBCRÍTICO TIPO ADS VIA MONTE CARLO PARA VALIDAÇÃO DE CÁLCULO DA REATIVIDADE

Mauricio Quelhas Antolin

Fevereiro/2013

Orientadores: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

Um dos grandes atrativos dos reatores ADS é decorrente da possibilidade de transmutação dos rejeitos produzidos pelas usinas nucleares convencionais, diminuindo a armazenagem dos rejeitos de longa meia-vida em repositórios geológicos de longa duração. Porém o comportamento cinético desses reatores ainda é uma questão em aberto, tendo em vista que não existe nenhum reator ADS em operação no mundo. Portanto este trabalho propõe um método de cálculo de reatividade para reatores subcríticos guiados por fonte (ADS) utilizando o método das derivadas parciais da potência nuclear, que permite um cálculo mais rápido e sem a necessidade do armazenamento de todo histórico de potência do reator. Os resultados foram comparados com simulações numéricas realizadas pelo método Monte Carlo e mostram boa concordância.

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

SIMULATION OF A ADS SUBCRITICAL REACTOR VIA MONTE CARLO FOR
VALIDATION OF REACTIVITY CALCULATION

Mauricio Quelhas Antolin

February/2013

Advisors: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

One of the great attractions of ADS reactors is due to the possibility of transmutation of waste produced by conventional power plants, reducing waste by reducing the storage of long half-life in long-term geological repositories. But the kinetic behavior of these reactors is still an open question, given that there is no ADS reactor in operation worldwide. Therefore this work proposes a method for calculating reactivity for subcritical reactors driven by source (ADS) using the method of partial derivatives of nuclear power, which allows a faster calculation and not need the storage the whole history of reactor power. The results were compared with numerical simulations performed by the Monte Carlo method, and show good agreement.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xi
1. Introdução.....	1
2. Equações Da Cinética Pontual para Reatores Subcríticos.....	8
2.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	9
2.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)	14
2.3. Cinética Inversa.....	17
2.3.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	18
2.3.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)	18
3. Métodos de Tratamento do Histórico de Potência.....	19
3.1. Método de Agrupamento	19
3.2. Memória Básica Indexada	21
3.3. Método da determinação da intensidade da fonte externa.....	23
3.4. Método das Derivadas	24
3.4.1. Análise para k impar	25
3.4.2. Análise para k par.....	29
4. Equações da cinética pontual com dependência temporal de β e Λ	32
4.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	32
4.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)	33
4.3. Método das Derivadas para Dependência Temporal de β e de Λ	34
4.3.1. Análise para k impar	35
4.3.2. Análise para k par.....	37
5. Cálculo da reatividade para algumas variações da potência nuclear	40
5.1. Potência Linear.....	40
5.1.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	40
5.1.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)	42
5.2. Potência Constante	43
5.2.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	43
5.2.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)	44
5.3. Potência Exponencial	45
5.3.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	45
5.3.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)	46
5.4. Variação Genérica da Potência	47
6. Variações da potência nuclear com Dependência temporal de β e Λ	49
6.1. Potencia Linear.....	49

6.1.1.	Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	49
6.1.2.	Termo Adjunto de Fonte (TAF)	50
6.2.	Potência Constante	51
6.2.1.	Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	51
6.2.2.	Termo Adjunto de Fonte (TAF)	51
6.3.	Potência Exponencial	52
6.3.1.	Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)	52
6.3.2.	Termo Adjunto de Fonte (TAF)	52
6.3.3.	Variação Genérica da Potência	53
7.	Simulação Numérica.....	54
7.1.	Funções Densidade de Probabilidades.....	57
7.2.	Método direto ou inverso	60
7.3.	Método da rejeição	63
7.4.	Métodos Monte Carlo para Reatores Subcríticos.....	65
7.5.	Conceito de Reatores ADS.....	66
8.	Descrição e Validação dos Códigos Utilizados	68
9.	Resultados.....	82
9.1.	Variação Linear da Potência Nuclear.....	83
9.2.	Potência Nuclear Constante	83
9.3.	Variação Exponencial da Potência	84
9.4.	Variação Genérica da Potência	86
9.5.	Variação temporal de β e Λ	86
9.5.1.	Variação linear da potência	87
9.5.2.	Potência constante	87
9.5.3.	Variação Exponencial da Potência	88
9.5.4.	Variação Genérica da Potência	89
9.6.	Parâmetros Nucleares	90
10.	Conclusão	93
11.	Referências Bibliográficas	95

Lista de Figuras

Figura 1.1 Diagrama geral de um reator híbrido. Retirado de Rubbia et al., 1996.....	3
Figura 7.1. Esquema simplificado do processo de simulação via MMC. Retirado de Yoriyaz, 2009.....	55
Figura 7.2: Histograma da massa (kg) de 25 lingotes de urânio	58
Figura 7.3: Histograma da massa, em quilogramas, de 150 lingotes de urânio.....	58
Figura 7.4: Curva de densidade de probabilidade para a variável aleatória contínua “massa dos lingotes de urânio”.....	59
Figura 7.5 Sorteio de uma variável aleatória da distribuição $p(x)$ usando método inverso (Salvat, et al. 2003).	61
Figura 7.6 Representação da história de uma partícula	62
Figura 7.7. Cálculo do número π através do método direto de Monte Carlo.	64
Figura 7.8 Processo de cálculo de π	65
Figura 7.9. Sistema nuclear de energia que consiste em um reator reproduzidor e um térmico. Fonte: Lodhi et al, 2009.....	66
Figura 7.10. Esquema de um reator regenerador com acelerador. Fonte: http://myrrha.sckcen.be/en/MYRRHA/ADS	67
Figura 8.1 Geometria utilizada na simulação do PWR.	72
Figura 8.2 Geometria utilizada na simulação do reator VVER.....	72
Figura 8.3. Geometria utilizada na simulação do reator tipo CANDU.	72
Figura 8.4. Núcleo de reator ABTR simulado no MCNPX.	73
Figura 8.5. Núcleo do reator ABTR, simulado no SERPENT.	77
Figura 8.6. Comparação do valor do k_{eff} entre o MCNPX e o SERPENT.	78
Figura 8.7. Comparação do valor do burnup entre o MCNPX e o SERPENT.....	79
Figura 8.8 Representação das áreas 'quentes' e 'frias' de um elemento combustível do reator PWR simulado.....	79
Figura 8.9: Gráfico mostrando as áreas quentes e frias para o reator ABRT. a) início do ciclo, b) 320 dias, c) 760 dias e d) 1100 dias.	80
Figura 9.1: Geometria utilizada na simulação de um reator subcrítico.	82

Lista de Tabelas

Tabela 1.1. Lista de alguns reatores rápidos no mundo (adaptado de http://www.world-nuclear.org/info/inf98.html - acessado em 21/10/2012).....	2
Tabela 8.1. Exemplo de um revestimento de zircaloy no MCNPX.....	71
Tabela 8.2. Exemplo de dióxido de urânio no SERPENT.....	71
Tabela 8.3 Comparação entre o SERPENT e o MCNPX para os reatores PWR, CANDU e VVER.	73
Tabela 8.4.Composição do Combustível 1 (densidade 10,818 g/cm ³).....	74
Tabela 8.5. Composição do Combustível 2 (densidade 10,851 g/cm ³).....	74
Tabela 8.6. Composição do Combustível 3 (densidade 10,818 g/cm ³).....	74
Tabela 8.7. Composição do revestimento da vareta de combustível (densidade 7,5357 g/cm ³).	75
Tabela 8.8. Composição do refletor (densidade 5,3908 g/cm ³).	75
Tabela 8.9. Composição da barra de controle (densidade 1,5643 g/cm ³).....	75
Tabela 8.10. Parâmetros gerais do reator ABTR.	75
Tabela 8.11. Intervalos de queima do reator ABTR	76
Tabela 8.12. Resultados da simulação do reator ABTR, utilizando os códigos MCNPX e no SERPENT.....	78
Tabela 9.1 Composição do combustível usado.....	82
Tabela 9.2: Valores utilizados nas equações da cinética pontual para sistemas subcríticos.	83
Tabela 9.3: Comparação dos dados obtidos para uma potência linear.	84
Tabela 9.4: Comparação dos dados obtidos para uma potência constante.	85
Tabela 9.5 Comparação dos dados obtidos para uma variação exponencial da potência.....	85
Tabela 9.6. Comparação dos resultados entre a simulação MC e os formalismos apresentados.....	86
Tabela 9.7. Variação linear com variação temporal de β e Λ	87
Tabela 9.8. Variação temporal de Λ para potência linear constante.....	88
Tabela 9.9. Comparação dos resultados para uma variação exponencial de potência, com β e Λ variáveis no tempo.....	89
Tabela 9.10. Comparação dos resultados para uma variação genérica de potência, com β e Λ variáveis no tempo.....	89
Tabela 9.11 Comparação de parâmetros nucleares.	91

1. Introdução

Grande parte da energia elétrica produzida por reatores nucleares são provenientes de reatores a água leve, devido à utilização de material físsil pouco enriquecido para seu funcionamento, o que torna sua construção e operação bastantes atrativos mesmo com os altos custos de construção e manutenção das centrais nucleares. Além disso, o conhecimento do ciclo térmico utilizados por esses reatores impulsionaram seu desenvolvimento (Pereira, 2002).

Porém, estes reatores utilizam ciclo de combustível aberto e produzem uma grande quantidade de rejeitos, o que inclui grande quantidade de elementos transurânicos (Am, Cm, Np entre outros), que possuem uma alta meia-vida (cerca de 10^7 anos).

Assim, existe uma grande preocupação na utilização desses reatores, não só na prevenção de acidentes, mas também devido à proliferação de armas nucleares, e à necessidade de repositórios finais de estocagem de longa duração (Iwanaga *et al.*, 2005), o que cria uma barreira de sua aplicação.

Atualmente, grande parte do combustível queimado no mundo é armazenado em piscinas dentro das próprias usinas nucleares, e em alguns casos o armazenamento, que deveria ser temporário, persiste há décadas. Estima-se que o aumento de combustível utilizado esteja em torno de 12.000 toneladas por ano, sendo que apenas 3.000 toneladas deste combustível vão para o reprocessamento¹.

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 os primeiros a serem considerados para esta finalidade, por proporcionar, além de uma melhor utilização das reservas de urânio, a possibilidade de transmutação dos elementos transurânicos. Porém, dificuldades na operação de reatores rápidos críticos, como por exemplo, o controle da criticalidade e também a oxidação do material usado como refrigerante (sódio) dificultaram o seu uso.

Cerca de 20 reatores rápidos já entraram em operação desde a década de 1950, sendo em sua maioria reatores de pesquisa. Comercialmente apenas o reator francês Superphenix chegou a entrar em operação comercial. Ele foi desenvolvido para gerar 1,2 GW de energia elétrica, porém, foi fechado em 1998 devido a falhas

¹ <http://www.world-nuclear.org/info/Nuclear-Fuel-Cycle/Nuclear-Wastes/Radioactive-Waste-Management/#.UTn-jaVtivM>

estruturais, alto custo e repetidos incidentes. O Superphoenix funcionou apenas 10 meses em 13 anos.

Os reatores rápidos são projetados para usar ^{238}U , e também ^{235}U usado na maioria dos reatores. Se esses reatores são projetados para produzir mais plutônio do que consomem, eles são chamados reatores reprodutores rápidos (FBR) (Lodhi *et al.*, 2009). Os reatores rápidos também podem queimar actínídeos que possuem alta meia vida que podem ser transmutados em outros elementos para o uso em reatores convencionais (LWR). A Tabela 1.1 mostra alguns reatores rápidos que entraram ou entrarão em operação no mundo.

Tabela 1.1. Lista de alguns reatores rápidos no mundo (adaptado de <http://www.world-nuclear.org/info/inf98.html> - acessado em 21/10/2012)

País	Reator	Tipo	Potência Elétrica (MWe)	Potência Térmica (MW)	Operação
USA	EBR 1		0.2	1.4	1951-63
	EBR II	Pesquisa	20	62.5	1963-94
	Fermi 1	Pesquisa	66	200	1963-72
	SEFOR			20	1969-72
	Fast Flux Test Facility	Pesquisa		400	1980-93
Inglaterra	Protoype FR	Protótipo	15	60	1959-77
	Dounreay FR	Pesquisa	270	650	1974-94
França	Rapsodie	Pesquisa		40	1966-82
	Phenix	Protótipo	250	563	1973-2009
	Superphenix	Comercial	1240	3000	1985-98
Alemanha	KNK 2	Pesquisa	21	58	1977-91
Índia	FBTR	Pesquisa		40	1985-
	PFBR	Protótipo	500	1250	2012-
Japão	Joyo	Pesquisa		140	1978-
	Monju	Protótipo	280	714	1994-96, 2010-
Cazaquistão	BN 350	Protótipo	135	750	1972-99
Rússia	BN 1/2			1/0.1	1950
	BR 5 /10 Obninsk	Pesquisa		5 /8	1959-71, 1973-
	BOR 60 Dimitrovgrad	Pesquisa	12	55	1969-
	BN 600 Beloyarsk 3	Protótipo	600	1470	1980-
	BN-800 Beloyarsk 4	Comercial	880	2000	2014-
China	CEFR	Pesquisa	20	65	2010-

Vários países têm programas de pesquisa e desenvolvimento para melhorar os reatores rápidos. Além disso, o projeto internacional em inovação de reatores nucleares e ciclo de combustível (INPRO) da agência internacional de energia atômica (AIEA) possui como ênfase os reatores rápidos, para funcionarem com o ciclo de combustível fechado.

Os problemas encontrados na operação dos reatores rápidos podem ser contornados utilizando um conceito onde os nêutrons que são produzidos por uma reação de “spallation” a um custo elétrico pequeno, entram em um meio multiplicativo com uma configuração de combustível/moderador (Rubbia *et al*, 1996). Esses reatores são chamados reatores híbridos devido ao acoplamento de um acelerador de partículas para seu funcionamento. A Figura 1.1 mostra uma concepção do esquema de funcionamento desses tipos de reatores.

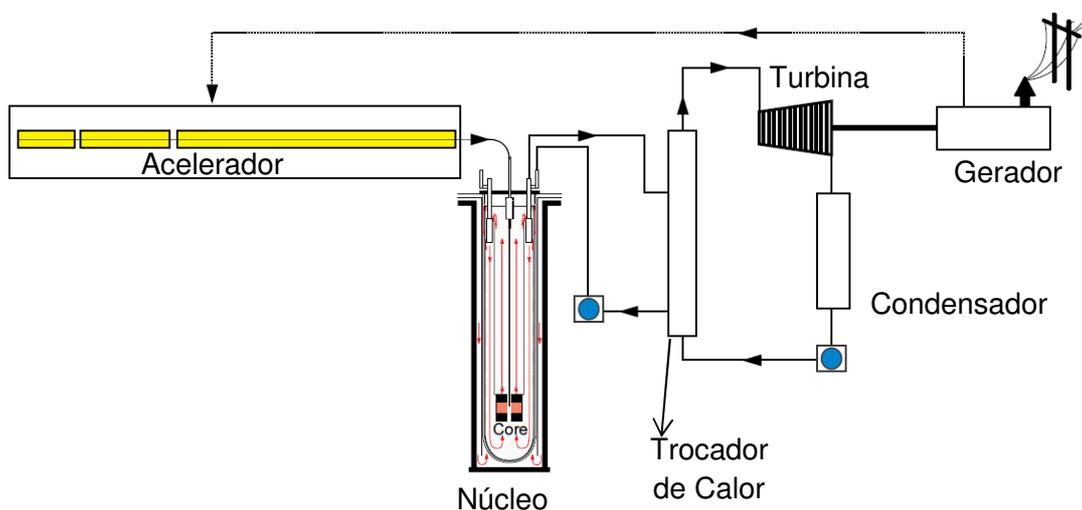


Figura 1.1 Diagrama geral de um reator híbrido. Retirado de Rubbia *et al.*, 1996

Este conceito de reator foi proposto desde os anos 1970 (Maniscalco *et al.*, 1974). Porém dificuldades tecnológicas adiaram seu desenvolvimento, pois estes aceleradores de partículas devem ser extremamente confiáveis durante a operação do reator.

Os reatores híbridos subcríticos são atraentes por proporcionar melhor utilização dos recursos naturais e tem sido amplamente reconhecidos como sendo altamente seguros (Rubbia *et al*, 1995). A principal vantagem deste tipo de reator é a operação de um reator com fator de multiplicação menor que a unidade ($k_{\text{eff}} < 1$), em

que as reações de fissão devem ser desencadeadas por um intenso feixe de partículas carregadas aceleradas, como por exemplo, prótons ou íons pesados com energia entre 0,5 - 5,0 GeV por nucleon (Perelygin *et al.*, 1999).

Além disso, o objetivo da transmutação é a minimização de rejeitos nucleares através da transmutação dos actínídeos menores (AM) como Np, Am e Cm. Portanto, esses reatores devem ser carregados com combustível que contenha grandes quantidades de AM.

Para poderem realizar a transmutação, esses reatores utilizam nêutrons no espectro rápido. Isto ocorre, porque nessa faixa de energia a seção de choque de fissão é mais favorável para a transmutação dos AM. Assim, esses reatores se caracterizam por uma baixa fração de nêutrons retardados, o que implica em rápidas e grandes variações de potência para uma pequena variação na reatividade (Sordo *et al.*, 2009). Segundo Rubbia *et al.* (1996), uma mudança súbita de +0,1 em um fator de multiplicação inicialmente a 0,95 causa um aumento na potência de aproximadamente 20%. Este aumento de reatividade em um reator rápido pode ter consequências catastróficas.

Para as especificações do feixe, que deve sustentar o funcionamento do reator, Rubbia *et al.* (1995) afirma que existe pouca ou nenhuma vantagem no uso de partículas mais sofisticadas indicando o uso exclusivo de prótons no feixe de partículas.

Os reatores híbridos ainda necessitam de um forte desenvolvimento o que inclui novos combustíveis e novas técnicas de reprocessamento, e tais programas ainda não foram totalmente desenvolvidos. De qualquer forma, o conceito de reator híbrido pode ser uma ferramenta potencial para obter o melhor domínio da fissão, para a geração de energia elétrica, e sem o uso de reatores regeneradores rápidos (que são críticos), que apresentam mais problemas na segurança do que os reatores subcríticos (Piera *et al.*, 2010).

Inicialmente, as especificações do feixe de partículas deveria ser capaz de enviar prótons de no mínimo 1 GeV de energia, o que implica em uma corrente de 10 à 15 mA. Caso mais energia seja necessária, pode-se usar vários feixes em paralelo (Rubbia *et al.*, 1995).

O alvo atingido pelo feixe de partículas aceleradas pode ser o urânio natural ou empobrecido, o chumbo líquido ou outro material de alto número atômico. Assim, os nêutrons gerados nesta reação entram no reator subcrítico que cerca o alvo.

Mais recentemente, Sordo *et al.* (2009) afirmou que o alvo mais eficiente para os reatores híbridos é a liga feita de chumbo e bismuto (LBE) no estado líquido, bombardeado com prótons de energia entre 600 MeV e 1 GeV. Devido a restrições

termodinâmicas, os alvos de materiais sólidos são indicados para instalações de baixa potência, sendo pouco prático para aplicações industriais que necessitam de potências muito maiores.

O acelerador deve fornecer uma corrente de prótons com ampla faixa de operação, pois para um reator que funcione com fator de multiplicação muito menor que a unidade, deve-se evitar um desligamento não programado durante seu funcionamento.

A produção de nêutrons na reação de “spallation” determina a potência térmica do reator dependendo do seu nível de subcriticalidade. A diminuição do valor do k_{eff} devido à queima de combustível deve ser compensada para manter a potência do reator constante, para isso pode-se aumentar a intensidade da fonte de nêutrons. Porém isto induz um estresse termomecânico, como a dilatação, devido ao aumento da temperatura além da maior degradação, não só na estrutura do reator, mas também, e principalmente, no alvo (Sordo *et al.*, 2009). O feixe de prótons deve ser projetado para manter a integridade do alvo durante todo o ciclo de operação.

O projeto do reator híbrido de pesquisa para aplicações de alta tecnologia (MYRRHA) começou em 1998 pelo Centro de Pesquisas Nucleares da Bélgica (SCK•CEN). O primeiro objetivo do MYRRHA será demonstrar o conceito de reator ADS a um nível razoável de potência e a viabilidade tecnológica da transmutação de actínídeos menores e de produtos de fissão de longa meia vida. O MYRRHA também irá ajudar o desenvolvimento da tecnologia de ligas de chumbo, necessário para os reatores da geração IV (Abderrahim *et al.*, 2005).

O reator está previsto para entrar em operação em 2023 e encontra-se em fase de licenciamento sendo um dos reatores híbridos com maior número de referências na literatura. Como ele pode trabalhar em modo crítico e subcrítico, o MYRRHA gera uma potência entre 50 e 100 MW_t . O acelerador injeta prótons de 600 MeV no núcleo do reator e utiliza combustível tipo MOX.

Apesar do grande número de referências encontradas na literatura, os dados de composição de combustível, parâmetros nucleares, materiais utilizados nesses reatores e o comportamento cinético são escassos. Por isso, neste trabalho foram utilizadas simulações numéricas pelo Método de Monte Carlo para a avaliação da cinética e dos parâmetros nucleares desses reatores.

Simulações computacionais de um sistema podem proporcionar importantes informações para o estudo preliminar de novas tecnologias. A simulação pelo método de Monte Carlo foi escolhida, pois é um dos métodos que melhor descreve geometrias complexas, e que fornece informações precisas e detalhadas em três dimensões, além de considerar a dependência temporal tanto para partículas carregadas quanto para

partículas neutras. Assim, o método Monte Carlo (MC) se torna um método atrativo para a simulação de um reator híbrido.

Este método é extremamente útil em problemas complexos que não podem ser modelados por códigos computacionais que utilizam métodos determinísticos. Outra grande aplicação do método MC é a realização de simulações de experimentos, onde os resultados são de difícil medição.

Para a simulação de um reator híbrido são necessários, além da simulação das partículas geradas através da reação de “spallation”, códigos que consigam prever a queima do combustível. Existem vários códigos na literatura com esta finalidade e que podem ser incorporados em códigos mais gerais de MC.

Atualmente, um dos códigos MC mais utilizados para simulação de reatores nucleares é o MCNPX (Hashemi-Nezhad *et al.*, 2002, Kadi *et al.*, 2001, Catsaros *et al.*, 2009). Este código é desenvolvido pelo Laboratório Nacional de Los Alamos e atualmente encontra-se na versão 2.6e.

O MCNPX é um código MC genérico de transporte de radiação para modelar a interação da radiação com a matéria. MCNPX significa Monte Carlo N-Particle eXtended. Ele estende as capacidades do MCNP4C3 a um grande número de partículas em uma ampla faixa de energia e para quase todas as aplicações sem custo adicional de tempo computacional. MCNPX faz cálculos tridimensionais e dependentes do tempo. Utiliza as bibliotecas mais novas de seção de choque nucleares, além de usar modelos físicos para as partículas que não possuem dados tabulados disponíveis.

O MCNPX 2.6e é capaz de realizar o cálculo do k_{eff} através das gerações de nêutrons, do fluxo de nêutrons, a evolução de combustível e também calcula as seções de choque. Porém, este código não permite a realização de simulações que necessitam fonte externa de nêutrons.

Atualmente, um dos únicos códigos MC que permite a simulação de um reator controlado com fonte externa é o SERPENT (Leppänen, 2012). Este código é específico para o estudo de reatores nucleares e se encontra na versão 1.1.18.

As simulações de MC podem fornecer importantes informações antes mesmo de se iniciar a construção, por exemplo, de um reator do tipo ADS, além de ter a possibilidade de indicar quais materiais podem ser utilizados. É claro que a simulação não substitui o experimento real, mas pode ajudar a prever melhorias antes de seu funcionamento. Além disso, as simulações podem ser utilizadas para a validação de novos métodos de cálculo da reatividade tanto para reatores híbridos quanto para reatores térmicos, já que é um dos parâmetros mais importantes em um reator nuclear.

Vários autores vêm propondo diferentes equações para a cinética de um reator subcrítico (Gandini *et al.*, 2000; Nishihara *et al.*, 2003; Silva *et al.*, 2011), Assim, com o intuito de obter a variação da reatividade para reatores subcríticos, obteve-se uma expressão para essa função com base na cinética pontual inversa para sistemas ADS, já que para esses sistemas o monitoramento da reatividade é vital para o funcionamento normal. E ainda, os reatores subcríticos guiados por fonte necessitam de uma forma de cálculo da reatividade mais rápida para evitar um “desligamento” não programado, para isso foi utilizado o método das derivadas no cálculo da reatividade, uma vez que este método não necessita da informação do histórico de potência.

A validação da expressão obtida para a reatividade proposta nesta tese foi feita através de simulação Monte Carlo (MC), uma vez que os dados de reatores subcríticos tipo ADS são encontrados em número reduzido na literatura.

No capítulo 2 são apresentadas duas formulações para as equações da cinética subcrítica e as respectivas expressões para a cinética inversa.

Alguns métodos de tratamento do histórico de potência são apresentados no Capítulo 3, sendo que o método das derivadas parciais da potência nuclear é tratado em detalhes.

Já no Capítulo 4, são obtidas as expressões da cinética pontual para casos em que a fração de nêutrons retardados (β) e o tempo médio de geração de nêutrons (Λ) são dependentes do tempo.

O capítulo 5 tem-se o cálculo da reatividade para alguns casos particulares da variação da potência nuclear com todos os parâmetros nucleares constantes E no Capítulo 6 temos as mesmas variações da potência nuclear com as variações temporais de β e de Λ .

Os fundamentos da simulação Monte Carlo são tratados no Capítulo 7, juntamente com os métodos específicos para a simulação de reatores nucleares.

No Capítulo 8 são apresentados e descritos os códigos Monte Carlos utilizados neste trabalho.

Já no Capítulo 9 são apresentados os resultados obtidos da reatividade com as expressões que foram apresentadas nos capítulos 5 e 6.

Finalmente, no Capítulo 10, são apresentadas as conclusões desta tese.

2. Equações Da Cinética Pontual para Reatores Subcríticos

A formulação da cinética pontual provou ser uma ferramenta poderosa para a avaliação da reatividade para diferentes tipos de reatores, tanto em operação normal quanto na partida do reator. Esta formulação descreve o comportamento dos nêutrons dentro do reator sem nenhuma dependência espacial, sendo que a distribuição dos nêutrons evolui de maneira pontual.

As diferentes propostas para a função importância encontradas na literatura resultam em diferentes equações da cinética pontual (Gandini *et al.*, 2000; Nishihara *et al.*, 2003; Silva *et al.*, 2011) para descrever o comportamento dos nêutrons dentro de reatores subcríticos.

Para um sistema sem fonte externa de nêutrons tem-se somente uma autofunção para toda a distribuição de nêutrons em todos os instantes dentro do reator. Porém, para reatores com fonte externa, esta afirmação pode não ser verdadeira, pois se a distribuição de nêutrons for dominada pela fonte externa pode envolver uma superposição de muitas autofunções. Assim, o comportamento pontual pode ser fatorado no produto de uma função da amplitude (apenas com dependência temporal) e uma função de forma (sem dependência temporal, mas com dependência das variáveis do espaço de fase) (Dulla, 2003).

As equações que descrevem o funcionamento dos reatores subcríticos podem ser obtidas a partir da equação de transporte, ou da equação de difusão (Gandini, 2000). Assim as equações da cinética espacial podem ser escritas da seguinte maneira

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -A\Psi(\vec{r}, t) + (1 - \beta) F\Psi(\vec{r}, t) + \sum_{i=1}^I \lambda_i c_i(\vec{r}, t) + q_{ext} \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_i(\vec{r}, t) = \beta_i F\Psi(\vec{r}, t) - \lambda_i c_i(\vec{r}, t), \quad i = 1, \dots, I \quad (2.2)$$

onde, v é a velocidade dos nêutrons, β_i é a fração de nêutrons retardados do grupo i e λ_i é a constante de decaimento dos precursores de nêutrons retardados do grupo i .

Nas seções seguintes são apresentados os formalismos para a cinética dos

reatores ADS encontrados nos trabalhos de Gandini *et al.* (2000) através da metodologia da teoria heurística de perturbação generalizada (HGPT) e no trabalho de Silva *et al.* (2011), em que é proposto um termo adjunto de fonte (TAF) que se torna significativo para reatores que operam longe da criticalidade.

2.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

A função importância proposta por Gandini *et al.* (2002), para o caso de nêutrons monoenergéticos, isotrópicos, meio homogêneo e sem dependência temporal, é solução da equação (Silva, 2011):

$$A_0^+ n_0^+(\vec{r}) - F_0^+ n_0^+(\vec{r}) - \frac{w_f}{P_0} \Sigma_f = 0, \quad (2.3)$$

onde w_f é a energia revertida por fissão e P_0 é a potencia nuclear sem perturbação.

Multiplicando a equação (2.1) por n_0^+ e integrando em \vec{r} , obtém-se

$$\left\langle n_0^+ \left| \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle = -\langle n_0^+ | A | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | (1 - \beta) F | \Psi \rangle + \sum_{i=1}^I \lambda_i \langle n_0^+ | c_i \rangle + \langle n_0^+ | q_{ext} \rangle. \quad (2.4)$$

Considerando-se as seguintes perturbações no sistema,

$$-A \rightarrow -A_0 + \delta A, \quad (2.5)$$

$$F \rightarrow F_0 + \delta F, \quad (2.6)$$

$$q_{ext} \rightarrow q_{ext}^{(0)} + \delta q_{ext}, \quad (2.7)$$

onde $-A_0$, F_0 e $q_{ext}^{(0)}$, são os estados estacionários não perturbados.

Substituindo e manipulando as equações (2.5), (2.6) e (2.7) na equação (2.4) resulta em

$$\begin{aligned} \left\langle n_0^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle &= \langle n_0^+ | A_0 | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | \delta A | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | (1-\beta) F_0 | \Psi \rangle + \\ &\langle n_0^+ | (1-\beta) \delta F | \Psi \rangle + \sum_{i=1}^l \lambda_i \langle n_0^+ | c_i \rangle + \langle n_0^+ | q_{ext}^{(0)} \rangle + \langle n_0^+ | \delta q_{ext} \rangle. \end{aligned} \quad (2.8)$$

Somando e subtraindo $\langle n_0^+ | \beta F | \Psi \rangle$, na equação (2.8) e lembrando que $\langle n_0^+ | q_{ext}^{(0)} \rangle = 1$, de acordo com Gandini (2001), vem

$$\begin{aligned} \left\langle n_0^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle &= \langle n_0^+ | A_0 | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | \delta A | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | (1-\beta) F_0 | \Psi \rangle + \\ &\langle n_0^+ | (1-\beta) \delta F | \Psi \rangle + \sum_{i=1}^l \lambda_i \langle n_0^+ | c_i \rangle + \langle n_0^+ | q_{ext}^{(0)} \rangle + 1 + \\ &\langle n_0^+ | \beta (F_0 + \delta F) | \Psi \rangle - \langle n_0^+ | \beta F | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Rearranjando os termos da equação acima, tem-se

$$\begin{aligned} \left\langle n_0^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle &= \langle n_0^+ | A_0 | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | F_0 | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | \delta A | \Psi \rangle + \\ &\langle n_0^+ | \delta F | \Psi \rangle + \sum_{i=1}^l \lambda_i \langle n_0^+ | c_i \rangle + \langle n_0^+ | \delta q_{ext} \rangle + 1 + \\ &-\langle n_0^+ | \beta F | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Ponderando a equação (2.3) com Ψ , obtém-se (Silva *et al.*, 2011)

$$\langle n_0^+ | A_0^+ | \Psi \rangle + \langle n_0^+ | F_0^+ | \Psi \rangle = -\frac{W}{P_0} \langle \Sigma_f | \Psi \rangle = 0 \quad (2.11)$$

Substituindo a equação (2.11) na equação (2.10) tem-se;

$$\begin{aligned} \left\langle n_o^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle &= \left\langle n_o^+ \left| \delta A + \delta F \right| \Psi \right\rangle - \left\langle n_o^+ \left| \beta F \right| \Psi \right\rangle + \sum_{i=1}^I \lambda_i \left\langle n_o^+ \left| c_i \right\rangle + \right. \\ &\left. \left\langle n_o^+ \left| \delta q_{ext} \right\rangle - \frac{w}{P_0} \left\langle \Sigma_f \right| \Psi \right\rangle + 1. \right. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Admitindo que,

$$\Psi(\vec{r}, t) \approx P(t) \phi_0(\vec{r}), \quad (2.13)$$

onde $\phi_0(\vec{r})$ é o fluxo de nêutron e $P(t)$ é a potência.

Substituindo a aproximação dada pela equação (2.13) na equação (2.12), obtém-se

$$\begin{aligned} \left\langle n_o^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| P(t) \phi_0(\vec{r}) \right\rangle &= \left\langle n_o^+ \left| \delta A + \delta F \right| P(t) \phi_0(\vec{r}) \right\rangle - \left\langle n_o^+ \left| \beta F \right| P(t) \phi_0(\vec{r}) \right\rangle + \\ &\sum_{i=1}^I \lambda_i \left\langle n_o^+ \left| c_i \right\rangle + \left\langle n_o^+ \left| \delta q_{ext} \right\rangle - \frac{w}{P_0} \left\langle \Sigma_f \right| P(t) \phi_0(\vec{r}) \right\rangle + 1. \end{aligned} \quad (2.14)$$

Como $\langle \bullet \rangle$ é uma integração no espaço, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \left\langle n_o^+ \left| v^{-1} \right| \phi_0(\vec{r}) \right\rangle \frac{dP(t)}{dt} &= \left\langle n_o^+ \left| \delta A + \delta F \right| \phi_0(\vec{r}) \right\rangle P(t) - \left\langle n_o^+ \left| \beta F \right| \phi_0(\vec{r}) \right\rangle P(t) + \\ &\sum_{i=1}^I \lambda_i \left\langle n_o^+ \left| c_i \right\rangle + \left\langle n_o^+ \left| \delta q_{ext} \right\rangle - \frac{w}{P_0} P(t) \left\langle \Sigma_f \right| \phi_0(\vec{r}) \right\rangle + 1. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Sendo $P_0 = w \langle \Sigma_f | \phi_0 \rangle$, tem-se;

$$\begin{aligned} \langle n_o^+ | v^{-1} | \phi_0(\vec{r}) \rangle \frac{dP(t)}{dt} = & \langle n_o^+ | \delta A + \delta F | \phi_0(\vec{r}) \rangle P(t) - \langle n_o^+ | \beta F | \phi_0(\vec{r}) \rangle P(t) + \\ & \sum_{i=1}^I \lambda_i \langle n_o^+ | c_i \rangle - P(t) + 1 + \langle n_o^+ | \delta q_{ext} \rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Dividindo a equação (2.16) por:

$$I = \langle n_o^+ | F | \phi_0 \rangle, \quad (2.17)$$

a equação (2.16), pode ser escrita da seguinte forma:

$$\Lambda_{eff}^n \frac{dP(t)}{dt} = (\rho^n - \beta_{eff}^n) P(t) + \sum_{i=1}^I \lambda_i C_i^n(t) + \zeta [1 - P(t)] + Q^n, \quad (2.18)$$

sendo:

$$\Lambda_{eff}^n \equiv \frac{\langle n_o^+ | v^{-1} | \phi_0(\vec{r}) \rangle}{I}, \quad (2.19)$$

$$\rho^n \equiv \frac{\langle n_o^+ | \delta A + \delta F | \phi_0(\vec{r}) \rangle}{I}, \quad (2.20)$$

$$\beta_{eff}^n \equiv \frac{\langle n_o^+ | \beta F | \phi_0(\vec{r}) \rangle}{I}, \quad (2.21)$$

$$C_i^n(t) \equiv \frac{\langle n_o^+ | c_i \rangle}{I}, \quad (2.22)$$

$$\zeta \equiv \frac{1}{I}, \quad (2.23)$$

$$Q^n \equiv \frac{\langle n_o^+ | \delta q_{ext} \rangle}{I}, \quad (2.24)$$

onde, ρ^n é uma reatividade generalizada, Q^n é o valor da fonte externa, $C_i^n(t)$ é a concentração de precursores e ζ é um termo de subcriticalidade inserido pela função importância.

Agora, ponderando a equação (2.2) com n_0^+ e dividindo pelo o fator de normalização dado pela equação (2.17), obtém-se;

$$\frac{d}{dt} C_i^n(t) = \beta_{i,eff}^n P(t) - \lambda_i C_i^n(t), \quad (2.25)$$

onde

$$\beta_{i,eff}^n \equiv \frac{\langle n_0^+ | \beta_i F | \phi_0 \rangle}{I}. \quad (2.26)$$

Portanto o conjunto de equações da cinética pontual para sistema subcrítico proposta por Gandini *et al.* (2000), considerando um grupo de precursores de nêutrons, é escrito da seguinte maneira:

$$\Lambda \frac{dP_n(t)}{dt} = [\rho(t) - \beta] P_n(t) + \lambda C(t) + \zeta [1 - P_n(t)] + q \quad (2.27)$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = \beta P_n(t) - \lambda C(t), \quad (2.28)$$

onde $P_n(t)$ é a potência normalizada, β é a fração de nêutrons retardados, ζ é o índice de subcriticalidade (que tende à zero quando o sistema se aproxima da criticalidade), $\rho(t)$ é a reatividade generalizada do sistema, $C(t)$ é a concentração de precursores e Λ tempo de geração médio de nêutrons.

2.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Na função importância proposta por Silva *et al.* (2011), existe um termo de fonte adjunto que se torna significativo para os sistemas que estão longe de criticidade. Portanto a equação da função importância proposta por Silva *et al.* (2011) foi;

$$A_0^\dagger \varepsilon_0^+(\vec{r}) - \frac{1}{k_{sub}} F_0^\dagger \varepsilon_0^+(\vec{r}) = \eta \frac{v \Sigma_f}{N_0}. \quad (2.29)$$

Multiplicando a equação (2.1) por ε_0^+ e integrando em \vec{r} obtém-se,

$$\left\langle \varepsilon_0^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle = -\left\langle \varepsilon_0^+ | A | \Psi \right\rangle + \left\langle \varepsilon_0^+ | (1 - \beta) F | \Psi \right\rangle + \sum_{i=1}^I \lambda_i \left\langle \varepsilon_0^+ | c_i \right\rangle + \left\langle \varepsilon_0^+ | q_{ext} \right\rangle. \quad (2.30)$$

Realizando uma perturbação no sistema da seguinte maneira,

$$-A \rightarrow -A_0 + \delta A, \quad (2.31)$$

$$F \rightarrow \frac{1}{k_{sub}} F_0 + \delta F. \quad (2.32)$$

Substituindo as equações (2.31) e (2.32) na equação (2.30) e rearranjando os termos vem,

$$\begin{aligned} \left\langle \varepsilon_0^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle &= \left\langle \varepsilon_0^+ | -A_0 | \Psi \right\rangle + \left\langle \varepsilon_0^+ | \delta A | \Psi \right\rangle + \left\langle \varepsilon_0^+ \left| (1 - \beta) \frac{1}{k_{sub}} F_0 \right| \Psi \right\rangle + \\ &\left\langle \varepsilon_0^+ | (1 - \beta) \delta F | \Psi \right\rangle + \sum_{i=1}^I \lambda_i \left\langle \varepsilon_0^+ | c_i \right\rangle + \left\langle \varepsilon_0^+ | q_{ext} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Somando e subtraindo $\langle \varepsilon_0^+ | \beta F | \Psi \rangle$ na equação (2.33) e utilizando a equação (2.32), pode-se escrever

$$\begin{aligned} \left\langle \varepsilon_0^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle &= \langle \varepsilon_0^+ | \delta A | \Psi \rangle + \langle \varepsilon_0^+ | -A_0 | \Psi \rangle + \left\langle \varepsilon_0^+ \left| \frac{1}{k_{sub}} F_0 \right| \Psi \right\rangle + \\ &\langle \varepsilon_0^+ | \delta F | \Psi \rangle + \sum_{i=1}^I \lambda_i \langle \varepsilon_0^+ | c_i \rangle + \langle \varepsilon_0^+ | q_{ext} \rangle - \langle \varepsilon_0^+ | \beta F | \Psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Agora, ponderando-se a equação (2.29), com $\Psi(\vec{r}, t)$, podemos escrever, segundo Silva (2011)

$$\langle \varepsilon_0^+ | -A_0 | \Psi \rangle + \left\langle \varepsilon_0^+ \left| \frac{1}{k_{sub}} F_0 \right| \Psi \right\rangle = -\eta \frac{v}{N_0} \langle \Sigma_f | \Psi \rangle. \quad (2.35)$$

Substituindo a equação (2.35) na equação (2.34)

$$\begin{aligned} \left\langle \varepsilon_0^+ \left| v^{-1} \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle &= \langle \varepsilon_0^+ | \delta A + \delta F | \Psi \rangle - \langle \varepsilon_0^+ | \beta F | \Psi \rangle + \\ &\sum_{i=1}^I \lambda_i \langle \varepsilon_0^+ | c_i \rangle - \eta \frac{v}{N_0} \langle \Sigma_f | \Psi \rangle + \langle \varepsilon_0^+ | q_{ext} \rangle. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Admitindo que,

$$\Psi(\vec{r}, t) \approx N(t) \phi_0(\vec{r}), \quad (2.37)$$

onde $\phi_0(\vec{r})$ é o fluxo de nêutron e $N(t)$ é a densidade nêutrons, tem-se, substituindo a equação (2.37) na equação (2.36)

$$\begin{aligned} \left\langle \varepsilon_o^+ | v^{-1} | \phi_0 \right\rangle \frac{dN(t)}{dt} = & \left\langle \varepsilon_o^+ | \delta A + \delta F | \phi_0 \right\rangle N(t) - \left\langle \varepsilon_o^+ | \beta F | \phi_0 \right\rangle N(t) + \\ & \sum_{i=1}^I \lambda_i \left\langle \varepsilon_o^+ | c_i \right\rangle - \eta \frac{\nu}{N_0} \left\langle \Sigma_f | \phi_0 \right\rangle N(t) + \left\langle \varepsilon_o^+ | q_{ext} \right\rangle, \end{aligned} \quad (2.38)$$

e como $N_0 = \nu \left\langle \Sigma_f | \phi_0 \right\rangle$, pode-se escrever a equação (2.38) da seguinte maneira,

$$\begin{aligned} \left\langle \varepsilon_o^+ | v^{-1} | \phi_0 \right\rangle \frac{dN(t)}{dt} = & \left\langle \varepsilon_o^+ | \delta A + \delta F | \phi_0 \right\rangle N(t) - \left\langle \varepsilon_o^+ | \beta F | \phi_0 \right\rangle N(t) + \\ & \sum_{i=1}^I \lambda_i \left\langle \varepsilon_o^+ | c_i \right\rangle - \eta N(t) + \left\langle \varepsilon_o^+ | q_{ext} \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Dividindo a equação (2.39) por $I = \left\langle \varepsilon_o^+ | F | \phi_0 \right\rangle$, obtém-se

$$\Lambda_{eff} \frac{dN(t)}{dt} = (\rho - \beta) N(t) + \sum_{i=1}^I \lambda_i C_i(t) - \Gamma N(t) + q, \quad (2.40)$$

onde

$$\Lambda_{eff} \equiv \frac{\left\langle \varepsilon_o^+ | v^{-1} | \phi_0 \right\rangle}{I}, \quad (2.41)$$

$$\rho \equiv \frac{\left\langle \varepsilon_o^+ | \delta A + \delta F | \phi_0 \right\rangle}{I}, \quad (2.42)$$

$$\beta_{eff} \equiv \frac{\left\langle \varepsilon_o^+ | \beta F | \phi_0 \right\rangle}{I}, \quad (2.43)$$

$$C_i(t) \equiv \frac{\left\langle \varepsilon_o^+ | c_i \right\rangle}{I}, \quad (2.44)$$

$$Q \equiv \frac{\left\langle \varepsilon_o^+ | q_{ext} \right\rangle}{I}, \quad (2.45)$$

$$\Gamma \equiv \frac{\eta}{I}, \quad (2.46)$$

sendo ρ é uma relatividade generalizada, Q é um termo relacionada à fonte externa,

Γ , um termo de subcriticalidade e $C_i(t)$ é a concentração de precursores.

Procedendo de maneira análoga para a equação (2.2), obtém-se

$$\frac{d}{dt} C_i(t) = \beta_{i,eff} N(t) - \lambda_i C_i(t), \quad (2.47)$$

onde

$$\beta_{i,eff} \equiv \frac{\langle \epsilon_0^+ | \beta_i F | \phi_0 \rangle}{I}. \quad (2.48)$$

Portanto o conjunto de equações da cinética pontual para sistema subcrítico segundo Silva (2011) é escrito como;

$$\Lambda \frac{dP(t)}{dt} = (\rho(t) - \beta) P(t) + \lambda \omega \Sigma_f C(t) - P(t) \Gamma + \omega \Sigma_f q, \quad (2.49)$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = \frac{\beta}{\varpi \cdot \Sigma_f} P(t) - \lambda C(t). \quad (2.50)$$

onde ϖ é a energia média liberada por fissão, Σ_f é a seção de choque macroscópica de fissão e β é a fração de nêutrons retardados.

2.3. Cinética Inversa

Usualmente o controle de um reator nuclear é feito através do monitoramento da reatividade, o que torna o método da cinética inversa relevante. A reatividade é caracterizada por uma mudança no fator de multiplicação do reator, o que o torna um dos parâmetros mais importantes em física de reatores. Nas seções seguintes serão apresentadas as equações para o cálculo da reatividade.

2.3.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

Para obter-se a expressão da cinética pontual inversa é necessário resolver as equações (2.27) e (2.28). Partindo da equação (2.28) e utilizando método do fator integrante, obtém-se:

$$C(t) = \beta \int_{-\infty}^t P_n(t') e^{-\lambda(t-t')} dt'. \quad (2.51)$$

Substituindo a equação (2.51) na equação (2.27), vem:

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = (\rho(t) - \beta) \frac{P_n(t)}{\Lambda} + \frac{\lambda\beta}{\Lambda} \int_{-\infty}^t P_n(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' + \frac{\zeta(1 - P_n(t))}{\Lambda} + Q, \quad (2.52)$$

onde $Q \equiv q/\Lambda$ é o termo de fonte de nêutrons. Resolvendo a equação (2.52) para $\rho(t)$, tem-se:

$$\rho(t) = \beta + \frac{\Lambda}{P_n(t)} \frac{dP_n(t)}{dt} - \frac{\beta P_0 e^{-\lambda t}}{P_n(t)} - \frac{\lambda\beta}{P_n(t)} \int_0^t P_n(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' - \frac{\zeta(1 - P_n(t))}{P_n(t)} - \frac{\Lambda Q}{P_n(t)}. \quad (2.53)$$

onde $P_0 = P(0)$.

2.3.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Procedendo de maneira análoga a seção anterior e partindo das equações (2.49) e (2.50), propostas por Silva *et al.*, encontra-se,

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \frac{\Lambda}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{\beta P_0}{P(t)} e^{-\lambda t} - \frac{\lambda\beta}{P(t)} \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' - \frac{\Lambda Q}{P(t)}. \quad (2.54)$$

3. Métodos de Tratamento do Histórico de Potência

Existem vários métodos de tratamento para a solução ou aproximação do histórico de potência. Esses métodos visam diminuir o tempo de cálculo computacional, sem que seja introduzido um erro muito grande e podem envolver ou não uma fonte externa de nêutrons.

A medição da reatividade a partir da cinética inversa permite que seu valor seja analisado a cada instante pela variação temporal do nível de potência do reator (Ansari *et al.*, 2001).

Devido ao grande interesse nos reatores ADS, apenas os métodos que envolvem fontes externas serão apresentados, sendo que o único que será detalhado é o método das derivadas da potência nuclear.

3.1. Método de Agrupamento

Na partida do reator a contribuição da fonte externa de nêutrons deve ser considerada. Assim, Hoogenboom *et al.* (1998) escrevem a equação da cinética inversa como

$$\rho(t) = \beta - \frac{1}{P(t)} \sum_i \beta_i \lambda_i \int_{-\infty}^t e^{-\lambda_i(t-t')} P(t') dt' - \frac{c\Lambda S}{P(t)}. \quad (3.1)$$

A integral da equação (3.1) pode ser calculada recursivamente através de amostragens de $P(t)$, usando interpolação linear entre duas amostras consecutivas, $P_{n-1} = P(t_{n-1})$ e $P_n = P(t_n)$ separadas por um intervalo Δt . Portanto,

$$I_n = \int_{-\infty}^{t_n} e^{-\lambda_i(t_n-t')} P(t') dt' = e^{-\lambda_i \Delta t} I_{n-1} + \frac{P_n}{\lambda_i} \left(1 - \frac{1 - e^{-\lambda_i \Delta t}}{\lambda_i \Delta t} \right) - \frac{P_{n-1}}{\lambda_i} \left(e^{-\lambda_i \Delta t} - \frac{1 - e^{-\lambda_i \Delta t}}{\lambda_i \Delta t} \right). \quad (3.2)$$

Introduzindo a seguinte função

$$g(t) = \sum_i \beta_i \lambda_i \int_{-\infty}^t e^{-\lambda_i(t-t')} P(t') dt'. \quad (3.3)$$

e reescrevendo a equação (3.1), em função de $g(t)$, tem-se

$$\rho(t) = \beta - \frac{g(t)}{P(t)} - \frac{S_\rho}{P(t)}. \quad (3.4)$$

Para um reator subcrítico com potência constante, na presença de fonte externa de nêutrons (S), obtém-se:

$$\rho = -\frac{S_\rho}{P} \quad \text{ou} \quad P = -\frac{S_\rho}{\rho}. \quad (3.5)$$

Este método pode ser resumido nos seguintes passos:

No intervalo desejado, divide-se as séries de $P(t)$ e $g(t)$ em três grupos de mesma duração;

1. Calcula-se os conjuntos de valores de cada um dos grupos (\bar{P}_1, \bar{g}_1) , (\bar{P}_2, \bar{g}_2) e (\bar{P}_3, \bar{g}_3) ;
2. Estima-se os valores do gradiente $(\beta - \rho)$ e o interseção $(-S\Lambda)$ através de

$$(\beta - \rho) = \frac{\bar{g}_3 - \bar{g}_1}{\bar{P}_3 - \bar{P}_1}, \quad (3.6)$$

$$(-S\Lambda) = \bar{g} - (\beta - \rho) \bar{P}. \quad (3.7)$$

3.2. Memória Básica Indexada

Neste método, Kitano *et al.* (2000) escreve a expressão da reatividade como

$$\rho(t) = \beta - \frac{\Lambda}{P(t)} \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) - \frac{\Lambda S(t)}{P(t)} + \frac{\Lambda}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt}. \quad (3.8)$$

Segundo o autor, o termo $\frac{\Lambda}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt}$ pode ser negligenciado, pois o erro inserido é menor que 1% para um amplo intervalo de reatividade. Portanto, a equação (3.8) é escrita como

$$\rho(t) = \beta - \frac{\Lambda}{P(t)} \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) - \frac{\Lambda S(t)}{P(t)}. \quad (3.9)$$

Por conveniência computacional, a equação da concentração de precursores pode ser escrita da seguinte forma (Kitano *et al.*, 2000).

$$C_i(t + \Delta t) = \frac{\beta_i}{\Lambda} \bar{P} \Delta t + C_i(t) - \lambda_i \bar{C}_i(t) \Delta t, \quad i = 1, \dots, 6, \quad (3.10)$$

onde \bar{P} e \bar{C}_i , são os valores médios para o incremento de tempo Δt .

Portanto, a equação (3.9), pode ser escrita na seguinte forma

$$g(t) \equiv \Lambda \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) = -S\Lambda + (\beta - \rho)P(t), \quad (3.11)$$

onde a fonte de nêutrons (S) e a reatividade são constantes. Esta equação pode ser considerada como uma equação linear de P(t).

Considerando que o sinal da potência tenha um grande erro, principalmente na operação em baixa potência, pode-se aplicar filtros para ruído de alta frequência e também de baixa frequência, da seguinte forma,

$$\bar{P}_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N P_j \quad (3.12)$$

e

$$P_i = P_{i-1} + \frac{\Delta t}{\Delta t + \tau} (\bar{P}_i - P_{i-1}), \quad (3.13)$$

onde P_j é a medida da potência medida, \bar{P}_i é a potência média e N é o número de amostras, τ é a constante de tempo e P_i é a saída da equação (3.13).

A introdução da memória básica indexada é, segundo os autores, um novo “termômetro” para diagnosticar um transiente, sendo definido por

$$[M.I.] \equiv \frac{\lambda_1 C_1}{\sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i} \frac{\beta}{\beta_1}. \quad (3.14)$$

A memória básica indexada (M.I.) é a normalização das emissões de nêutrons retardados do primeiro grupo sobre o total de emissões de nêutrons retardados. Note que a M.I. assume valor unitário quando o reator está em estado estacionário. Assim ela pode ser usada para detectar o início e o final de um transiente para a aplicação do método de grupo.

3.3. Método da determinação da intensidade da fonte externa

A equação da cinética inversa, escrita com uma discretização no tempo e assumindo que a potência do reator varia com $n(t) = n_{j-1}e^{\mu_j t}$, onde $\mu_j = \log(n_j/n_{j-1})/\Delta t$ é dada por (Tamura, 2003),

$$\rho_j = \beta_{eff} + \frac{\Lambda}{n_j} \frac{\Delta n_j}{\Delta t} - \frac{\Lambda}{n_j} \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_{i,j} - \frac{\Lambda}{n_j} S, \quad (3.15)$$

onde,

$$C_{i,j} = C_{i,j-1} e^{-\lambda_i \Delta t} + \frac{\beta_i}{\Lambda} \frac{n_j - n_{j-1} e^{-\lambda_i \Delta t}}{\frac{1}{n_j} \frac{\Delta n_j}{\Delta t} + \lambda_i}. \quad (3.16)$$

Note que o subíndice j representa os valores no tempo j e S é a fonte externa de nêutrons.

Considerando as seguintes condições iniciais,

$$C_{i,0} = n_0 \beta_i / (\lambda_i \Lambda) \quad (3.17)$$

e

$$\rho_0 = -\Lambda S / n_0, \quad (3.18)$$

tanto a reatividade ρ quanto a fonte S são obtidas pelo método dos mínimos quadrados (Díaz, 2007).

3.4. Método das Derivadas

As equações (2.53) e (2.54) obtidas no capítulo anterior envolvem a mesma integral em função da potência do reator. Esta integral, também chamada de histórico de potência, deve ser calculada desde o início da operação do reator até o tempo atual de maneira contínua, ou seja, exige monitoramento constante da potência. Além disso, o armazenamento desta informação é necessário durante toda operação do reator para possibilitar a recuperação da informação da reatividade, caso ocorra uma interrupção em seu cálculo.

Para o caso dos reatores subcríticos o monitoramento contínuo da reatividade é imprescindível para seu funcionamento normal. Como a produção de nêutrons é insuficiente para manter as reações nucleares nesses reatores, a reatividade pode ser um parâmetro utilizado para o monitoramento e ajuste da intensidade do feixe de prótons para manter as reações nucleares produção de energia elétrica constante durante a operação do reator.

O método das derivadas está baseado na integração por partes da integral do histórico de potência da equação da cinética pontual inversa, resultando em uma série de potências em função da potência nuclear do reator com dependência temporal (Díaz, 2007). Este método de cálculo da reatividade permite a possibilidade do reinício do cálculo após sua interrupção causada por um problema no funcionamento do equipamento de medição, ou seja, com este método não é necessário um cálculo contínuo. Além disso, pode-se obter a reatividade sem a dependência da memória da potência nuclear o que torna o cálculo mais rápido se comparado ao tempo necessário para a resolução do histórico de potência.

Para a obtenção da expressão do método das derivadas, deve-se resolver a integral da equação (2.54) ou da equação (2.53) por partes. Assim obtém-se:

$$I(t) \equiv \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' = \frac{P(t)}{\lambda} - \frac{P(0)e^{-\lambda t}}{\lambda} - \frac{1}{\lambda} \int_0^t P^{(1)}(t') e^{-\lambda(t-t')} dt', \quad (3.19)$$

onde $P^{(n)}(t)$ representa a derivada de ordem n da potência em relação ao tempo. Resolvendo a integral da equação (3.19) tem-se:

$$I(t) = \frac{P(t)}{\lambda} - \frac{P(0)e^{-\lambda t}}{\lambda} - \frac{P^{(1)}(t)}{\lambda^2} + \frac{P^{(1)}(0)e^{-\lambda t}}{\lambda^2} - \frac{1}{\lambda^2} \int_0^t P^{(2)}(t') e^{-\lambda(t-t')} dt'. \quad (3.20)$$

Novamente, resolvendo a integral da equação (3.20) por partes, obtém-se:

$$I(t) = \frac{P(t)}{\lambda} - \frac{P(0)e^{-\lambda t}}{\lambda} - \frac{P^{(1)}(t)}{\lambda^2} + \frac{P^{(1)}(0)e^{-\lambda t}}{\lambda^2} + \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^3} - \frac{P^{(2)}(0)e^{-\lambda t}}{\lambda^3} - \frac{1}{\lambda^3} \int_0^t P^{(3)}(t') e^{-\lambda(t-t')} dt'. \quad (3.21)$$

Aplicando esta solução n vezes, podemos escrever

$$I(t) = \sum_{n=0}^k (-1)^n \frac{P^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^k (-1)^n \frac{P^{(n)}(0)e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}} - \int_0^t \frac{P^{(k+1)}(t') e^{-\lambda(t-t')}}{\lambda^{k+1}} dt', \quad (3.22)$$

ou ainda,

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' + \int_0^t \frac{P^{(k+1)}(t') e^{-\lambda(t-t')}}{\lambda^{k+1}} dt' = \sum_{n=0}^k (-1)^n \frac{P^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^k (-1)^n \frac{P^{(n)}(0)e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}}. \quad (3.23)$$

3.4.1. Análise para k ímpar

Se k é um número ímpar, logo $k=2m-1$, assim a equação (3.23) pode ser escrita como;

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' + \int_0^t \frac{P^{(2m)}(t') e^{-\lambda(t-t')}}{\lambda^{2m}} dt' = \sum_{n=0}^{2m-1} (-1)^n \frac{P^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^{2m-1} (-1)^n \frac{P^{(n)}(0)e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}}. \quad (3.24)$$

Supondo que a forma de $P(t)$ satisfaça às condições abaixo (Díaz *et al.*, 2007),

$$P^{(2n-1)}(t) = P^{(1)}(t) \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} \right\}^{n-1} \quad (3.25)$$

e

$$P^{(2n)}(t) = P^{(1)}(t) \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} \right\}^n, \quad (3.26)$$

onde $\frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} = cte, \quad \forall t.$

Estas condições podem ser verificadas para potência com variação linear, constante e exponencial, entre outras.

Substituindo a equação (3.26) na equação (3.24), tem-se;

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' + \frac{1}{\lambda^{2m}} \int_0^t P^{(1)}(t) \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} \right\}^n e^{-\lambda(t-t')} dt' = \\ \sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) - \sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) e^{-\lambda t}. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Como $\frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} = cte$, podemos escrever a equação (3.27) como:

$$\left[1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} \right\}^n \right] \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' = \sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) - \sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) e^{-\lambda t}. \quad (3.28)$$

Logo,

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' = S_1(t) + S_2(t), \quad (3.29)$$

sendo

$$S_1 \equiv \frac{1}{\left[1 - \left\{\frac{P^{(2)}(t)}{P(t)}\right\}^n\right]} \sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) \quad (3.30)$$

e

$$S_2 \equiv - \frac{1}{\left[1 - \left\{\frac{P^{(2)}(t)}{P(t)}\right\}^n\right]} \sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) e^{-\lambda t}. \quad (3.31)$$

Analisando, inicialmente a equação (3.30), pode-se escrever o seu somatório da seguinte forma

$$\sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) = \sum_{n=0}^{m-1} \frac{P^{(2n)}(t)}{\lambda^{2n+1}} - \sum_{n=0}^{m-1} \frac{P^{(2n+1)}(t)}{\lambda^{2n+2}}. \quad (3.32)$$

Utilizando as equações (3.25) e (3.26) na equação (3.32), obtém-se;

$$\sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) = \left[\frac{P(t)}{\lambda} - \frac{P^{(1)}(t)}{\lambda^2} \right] \sum_{n=0}^{m-1} \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^{n-1}. \quad (3.33)$$

Lembrando que

$$\sum_{n=0}^m ar^n = \frac{a(1-r^{m+1})}{1-r}, \quad (3.34)$$

identificando $r = \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)}$ e $a = 1$, na equação (3.33) vem;

$$\sum_{n=0}^{2m-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t) = \left[\frac{P(t)}{\lambda} - \frac{P^{(1)}(t)}{\lambda^2} \right] \frac{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^n}{1 - \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)}}. \quad (3.35)$$

Substituindo o resultado da equação (3.35) na equação (3.30), obtém-se,

$$S_1 = \frac{\frac{P(t)}{\lambda} - \frac{P^{(1)}(t)}{\lambda^2} \frac{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^n}{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}}}{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^n} \frac{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^n}{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}}. \quad (3.36)$$

Simplificando e rearranjando os termos da equação (3.36), chega-se a

$$S_1 = \frac{\lambda P(t) - P^{(1)}(t)}{\lambda^2 P(t) - P^{(2)}(t)} P(t). \quad (3.37)$$

Fazendo $t=0$ na equação (3.31), e procedendo de maneira análoga é fácil mostrar que:

$$S_2 = - \frac{\lambda P(0) - P^{(1)}(0)}{\lambda^2 P(0) - P^{(2)}(0)} P(0) e^{-\lambda t}. \quad (3.38)$$

Finalmente, podemos escrever a integral do histórico de potência (equação 3.29) como;

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' = \frac{\lambda P(t) - P^{(1)}(t)}{\lambda^2 P(t) - P^{(2)}(t)} P(t) - \frac{\lambda P(0) - P^{(1)}(0)}{\lambda^2 P(0) - P^{(2)}(0)} P(0) e^{-\lambda t}. \quad (3.39)$$

3.4.2. Análise para k par

Se k for um número par, então $k=2m-2$, assim a equação (3.23) torna-se:

$$\int_0^t P(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' + \frac{1}{\lambda^{2m-1}} \int_0^t P^{(2m-1)}(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = \sum_{n=0}^{2m-2} (-1)^n \frac{P^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^{2m-2} (-1)^n \frac{P^{(n)}(0) e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}}. \quad (3.40)$$

Utilizando a condição da equação (3.25), vem

$$\int_0^t P(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' + \frac{1}{\lambda^{2m-1}} \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} \right\}^{m-1} \int_0^t P^{(1)}(t) e^{-\lambda(t-t')} dt' = \sum_{n=0}^{2m-2} (-1)^n \frac{P^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^{2m-2} (-1)^n \frac{P^{(n)}(0) e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}}. \quad (3.41)$$

Da equação (3.19) pode-se escrever

$$\int_0^t P^{(1)}(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = P(t) - P(0) e^{-\lambda t} - \lambda \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt'. \quad (3.42)$$

Substituindo a equação (3.42) na equação (3.41), e rearranjando os termos, obtém-se;

$$\int_0^t P(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = \frac{1}{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^{m-1}} \sum_{n=0}^{2m-2} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} (P^{(n)}(t) - P^{(n)}(0) e^{-\lambda t}) - \frac{1}{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^{m-1}} \frac{(P^{(n)}(t) - P^{(n)}(0) e^{-\lambda t}) \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{P(t)} \right\}^{m-1}}{\lambda^{2m-1}}. \quad (3.43)$$

Desenvolvendo o último termo do somatório da equação (3.43), tem-se;

$$\int_0^t P(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = S_3(t) - S_4(t). \quad (3.44)$$

sendo

$$S_3(t) \equiv \frac{1}{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^{m-1}} \sum_{n=0}^{2m-3} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(t), \quad (3.45)$$

e

$$S_4(t) \equiv \frac{1}{1 - \left\{ \frac{P^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^{m-1}} \sum_{n=0}^{2m-3} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} P^{(n)}(0) e^{-\lambda t}. \quad (3.46)$$

Procedendo de maneira análoga à seção anterior, é fácil mostrar que;

$$S_3(t) = \frac{\lambda P(t) - P^{(1)}(t)}{\lambda^2 P(t) - P^{(2)}(t)} P(t) \quad (3.47)$$

e

$$S_4(t) = -\frac{\lambda P(0) - P^{(1)}(0)}{\lambda^2 P(0) - P^{(2)}(0)} P(0) e^{-\lambda t}. \quad (3.48)$$

Finalmente podemos escrever, para valores pares de k, que o histórico de potência é dado pela seguinte expressão:

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' = \frac{\lambda P(t) - P^{(1)}(t)}{\lambda^2 P(t) - P^{(2)}(t)} P(t) - \frac{\lambda P(0) - P^{(1)}(0)}{\lambda^2 P(0) - P^{(2)}(0)} P(0) e^{-\lambda t}. \quad (3.49)$$

Tanto a análise para valores pares quanto para valores ímpares de k resultam na mesma expressão. Sendo assim, a integral do histórico de potência (equação 3.19) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\int_0^t P(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = \frac{\lambda P(t) - P^{(1)}(t)}{\lambda^2 P(t) - P^{(2)}(t)} P(t) - \frac{\lambda P(0) - P^{(1)}(0)}{\lambda^2 P(0) - P^{(2)}(0)} P(0) e^{-\lambda t}. \quad (3.50)$$

Assim, pode-se escrever a equação da cinética inversa baseada na formulação proposta por Gandini (2001), equação (2.52), como;

$$\rho(t) = \beta + \frac{\Lambda}{P_n(t)} \frac{dP_n(t)}{dt} - \frac{\beta P_0 e^{-\lambda t}}{P_n(t)} - \frac{\zeta(1 - P_n(t))}{P_n(t)} - \frac{\Lambda Q}{P_n(t)} - \frac{\lambda \beta}{P_n(t)} \left\{ \frac{\lambda P_n(t) - P_n^{(1)}(t)}{\lambda^2 P_n(t) - P_n^{(2)}(t)} P_n(t) - \frac{\lambda P_n(0) - P_n^{(1)}(0)}{\lambda^2 P_n(0) - P_n^{(2)}(0)} P_n(0) e^{-\lambda t} \right\}. \quad (3.51)$$

E, para o formalismo proposto por Silva *et al.* (2011), tem-se substituindo a equação (3.50) na equação (2.54) a expressão para a reatividade sem a dependência do histórico de potência.

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \frac{\Lambda}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{\beta P_0}{P(t)} e^{-\lambda t} - \frac{\Lambda Q}{P(t)} - \frac{\lambda \beta}{P(t)} \left\{ \frac{\lambda P(t) - P^{(1)}(t)}{\lambda^2 P(t) - P^{(2)}(t)} P(t) - \frac{\lambda P(0) - P^{(1)}(0)}{\lambda^2 P(0) - P^{(2)}(0)} P(0) e^{-\lambda t} \right\}. \quad (3.52)$$

4. Equações da cinética pontual com dependência temporal de β e Λ .

Nas seções anteriores as mudanças da composição do combustível nuclear não foram levadas em consideração. Essas mudanças podem levar a cálculos discrepantes da reatividade quando comparados a medições experimentais nos reatores. Além disso, conhecer com precisão o valor da reatividade contribui com a melhora do desempenho da central nuclear.

Assim, nesta seção, as dependências temporais da fração de nêutrons retardados e do tempo médio de geração de nêutrons serão consideradas para o cálculo da reatividade, tanto na formulação proposta por Gandini *et al.* (2000) quanto na formulação proposta por Silva *et al.* (2011). Os demais parâmetros nucleares permanecerão constantes, pois suas variações são pouco significativas (Scall, 2010).

4.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

As equações propostas por Gandini *et al.* (2000) com dependência temporal da fração de nêutrons retardados e do tempo médio de geração de nêutrons é dada por:

$$\Lambda(t) \frac{dP_n(t)}{dt} = (\rho(t) - \beta(t)) P_n(t) + \lambda C(t) + \zeta (1 - P_n(t)) + q \quad (4.1)$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = \beta(t) P_n(t) - \lambda C(t). \quad (4.2)$$

Procedendo de maneira análoga à seção 2.3.1, pode-se escrever, partindo da equação (4.2), que a concentração de precursores é dada pela seguinte expressão:

$$C(t) = \int_{-\infty}^t \beta(t') P_n(t') e^{-\lambda(t-t')} dt'. \quad (4.3)$$

Substituindo a equação (4.3) na equação (4.1) obtém-se a seguinte expressão para a reatividade;

$$\rho(t) = \beta(t) + \frac{\Lambda(t)}{P_n(t)} \frac{dP_n(t)}{dt} - \frac{\lambda A_0}{P_n(t)} e^{-\lambda t} - \frac{\lambda}{P_n(t)} \int_0^t A(t') e^{-\lambda(t-t')} dt', \quad (4.4)$$

$$- \frac{\zeta [1 - P_n(t)]}{P_n(t)} - \frac{\Lambda(t) \tilde{Q}(t)}{P(t)},$$

onde $A \equiv \beta(t) P_n(t)$ e $\tilde{Q}(t) \equiv q / \Lambda(t)$.

4.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

As equações da cinética propostas por Silva et al. (2011) com dependência temporal de Λ e β , são:

$$\Lambda(t) \frac{dP(t)}{dt} = (\rho(t) - \beta(t)) P(t) + \lambda \omega \Sigma_f C(t) + P(t) \Gamma + \omega \Sigma_f q, \quad (4.5)$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = \frac{\beta(t)}{\omega \Sigma_f} P(t) - \lambda C(t). \quad (4.6)$$

Resolvendo a equação (4.6) pelo o método do fator integrante, obtém-se

$$C(t) = \frac{1}{\omega \Sigma_f} \int_{-\infty}^t \beta(t') P(t') e^{-\lambda(t-t')} dt', \quad (4.7)$$

Substituindo a equação (4.7) na equação (4.5) chega-se a expressão da reatividade com dependência temporal de β e Λ ,

$$\rho(t) = \beta(t) + \frac{\Lambda(t)}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{\lambda A_0}{P(t)} e^{-\lambda t} - \frac{\lambda}{P(t)} \int_0^t A(t') e^{-\lambda(t-t')} dt', \quad (4.8)$$

$$-\Gamma - \frac{\Lambda(t) Q'(t)}{P(t)},$$

onde $A(t) \equiv \beta(t)P(t)$ e $Q'(t) \equiv \omega \Sigma_f q / \Lambda(t)$.

4.3. Método das Derivadas para Dependência Temporal de β e de Λ

De acordo com a seção 3.4, a integral das equações (4.4) e (4.8) podem ser resolvidas por partes, assim obtém-se (Scal, 2012)

$$I'(t) \equiv \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} A(t') dt' = \frac{A(t)}{\lambda} - \frac{A(0)e^{-\lambda t}}{\lambda} - \frac{1}{\lambda} \int_0^t A^{(1)}(t') e^{-\lambda(t-t')} dt', \quad (4.9)$$

onde $A^{(n)}(t)$ representa a derivada de ordem n da potência em relação ao tempo.

Resolvendo a integral da equação (4.9) por partes, n vezes pode-se escrever,

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} A(t') dt' + \int_0^t \frac{A^{(k+1)}(t') e^{-\lambda(t-t')}}{\lambda^{k+1}} dt' =$$

$$\sum_{n=0}^k (-1)^n \frac{A^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^k (-1)^n \frac{A^{(n)}(0) e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}}. \quad (4.10)$$

4.3.1. Análise para k ímpar

Se k é um número ímpar, logo $k=2j-1$, assim a equação (4.10) pode ser escrita como;

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} P(t') dt' + \int_0^t \frac{P^{(2j)}(t') e^{-\lambda(t-t')}}{\lambda^{2j}} dt' = \sum_{n=0}^{2j-1} (-1)^n \frac{P^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^{2j-1} (-1)^n \frac{P^{(n)}(0) e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}}. \quad (4.11)$$

Admitindo que a forma de A(t) satisfaça as condições abaixo (Díaz *et al.*, 2007),

$$A^{(2n-1)}(t) = A^{(1)}(t) \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{A(t)} \right\}^{n-1} \quad (4.12)$$

e

$$A^{(2n)}(t) = A^{(1)}(t) \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{A(t)} \right\}^n, \quad (4.13)$$

onde $\frac{A^{(2)}(t)}{A(t)} = cte, \quad \forall t.$

Estas condições podem ser verificadas para potência com variação linear, constante e exponencial.

Substituindo as condições (4.12) e (4.13) na equação(4.11), tem-se;

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} A(t') dt' + \frac{1}{\lambda^{2k}} \int_0^t A^{(1)}(t) \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{A(t)} \right\}^n e^{-\lambda(t-t')} dt' = \sum_{n=0}^{2j-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(t) - \sum_{n=0}^{2j-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(0) e^{-\lambda t}, \quad (4.14)$$

ou ainda,

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} A(t') dt' = S_1(t) + S_2(t), \quad (4.15)$$

sendo

$$S_1(t) \equiv \frac{1}{\left[1 - \left\{\frac{A^{(2)}(t)}{A(t)}\right\}^n\right]} \sum_{n=0}^{2j-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(t) \quad (4.16)$$

e

$$S_2(t) \equiv - \frac{1}{\left[1 - \left\{\frac{A^{(2)}(t)}{A(t)}\right\}^n\right]} \sum_{n=0}^{2j-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(t) e^{-\lambda t}. \quad (4.17)$$

Reescrevendo o somatório da equação (4.16), tem-se;

$$\sum_{n=0}^{2j-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(t) = \sum_{n=0}^{j-1} \frac{A^{(2n)}(t)}{\lambda^{2n+1}} - \sum_{n=0}^{j-1} \frac{A^{(2n+1)}(t)}{\lambda^{2n+2}}. \quad (4.18)$$

Utilizando as condições (4.12), (4.13) e recordando da relação (3.34), pode-se escrever,

$$\sum_{n=0}^{2j-1} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(t) = \left[\frac{A(t)}{\lambda} - \frac{A^{(1)}(t)}{\lambda^2} \right] \frac{1 - \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{\lambda^2 A(t)} \right\}^n}{1 - \frac{A^{(2)}(t)}{\lambda^2 A(t)}}. \quad (4.19)$$

Substituindo o resultado da equação (4.19) na equação (4.16), obtém-se, após simples manipulações algébricas,

$$S_1 = \frac{\lambda A(t) - A^{(1)}(t)}{\lambda^2 A(t) - A^{(2)}(t)} A(t). \quad (4.20)$$

Fazendo $t=0$ na equação (4.17) e procedendo de maneira análoga é fácil mostrar que:

$$S_2 = -\frac{\lambda A(0) - A^{(1)}(0)}{\lambda^2 A(0) - A^{(2)}(0)} A(0) e^{-\lambda t}. \quad (4.21)$$

Finalmente, pode-se escrever a equação (4.9) como;

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} A(t') dt' = \frac{\lambda A(t) - A^{(1)}(t)}{\lambda^2 A(t) - A^{(2)}(t)} A(t) - \frac{\lambda A(0) - A^{(1)}(0)}{\lambda^2 A(0) - A^{(2)}(0)} A(0) e^{-\lambda t}. \quad (4.22)$$

4.3.2. Análise para k par

Se k for um número par $k+1 = 2j-1$, então $k=2j-2$, assim a equação (4.10) torna-se:

$$\int_0^t A(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' + \frac{1}{\lambda^{2j-1}} \int_0^t A^{(2j-1)}(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = \sum_{n=0}^{2j-2} (-1)^n \frac{A^{(n)}(t)}{\lambda^{n+1}} - \sum_{n=0}^{2j-2} (-1)^n \frac{A^{(n)}(0) e^{-\lambda t}}{\lambda^{n+1}}. \quad (4.23)$$

Utilizando a condição da equação (4.12) e lembrando-se da equação (4.9), pode-se escrever a equação (4.23) como

$$\int_0^t A(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = \frac{1}{1 - \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^{j-1}} \sum_{n=0}^{2j-2} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} \left(A^{(n)}(t) - A^{(n)}(0) e^{-\lambda t} \right) - \frac{1}{1 - \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{\lambda^2 P(t)} \right\}^{j-1}} \frac{\left(A^{(n)}(t) - A^{(n)}(0) e^{-\lambda t} \right) \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{A(t)} \right\}^{j-1}}{\lambda^{2j-1}}. \quad (4.24)$$

Abrindo o último termo do somatório da equação (4.24), tem-se;

$$\int_0^t A(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = S_3(t) - S_4(t), \quad (4.25)$$

sendo

$$S_3(t) \equiv \frac{1}{1 - \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{\lambda^2 A(t)} \right\}^{j-1}} \sum_{n=0}^{2j-3} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(t) \quad (4.26)$$

e

$$S_4(t) \equiv \frac{1}{1 - \left\{ \frac{A^{(2)}(t)}{\lambda^2 A(t)} \right\}^{j-1}} \sum_{n=0}^{2j-3} \frac{(-1)^n}{\lambda^{n+1}} A^{(n)}(0) e^{-\lambda t}. \quad (4.27)$$

Procedendo de maneira análoga à seção anterior, tem-se;

$$S_3(t) = \frac{\lambda A(t) - A^{(1)}(t)}{\lambda^2 A(t) - A^{(2)}(t)} A(t) \quad (4.28)$$

e

$$S_4(t) = -\frac{\lambda A(0) - A^{(1)}(0)}{\lambda^2 A(0) - A^{(2)}(0)} A(0) e^{-\lambda t}. \quad (4.29)$$

Finalmente podemos escrever, para valores pares de k,

$$\int_0^t e^{-\lambda(t-t')} A(t') dt' = \frac{\lambda A(t) - A^{(1)}(t)}{\lambda^2 A(t) - A^{(2)}(t)} A(t) - \frac{\lambda A(0) - A^{(1)}(0)}{\lambda^2 A(0) - A^{(2)}(0)} A(0) e^{-\lambda t}. \quad (4.30)$$

Tanto a análise para valores pares quanto para valores ímpares de k resultam na mesma expressão, assim a equação (4.9) pode ser escrita da seguinte forma,

$$\int_0^t A(t') e^{-\lambda(t-t')} dt' = \frac{\lambda A(t) - A^{(1)}(t)}{\lambda^2 A(t) - A^{(2)}(t)} A(t) - \frac{\lambda A(0) - A^{(1)}(0)}{\lambda^2 A(0) - A^{(2)}(0)} A(0) e^{-\lambda t}. \quad (4.31)$$

Assim, pode-se escrever a equação da cinética pontual inversa com dependência temporal de β e Λ , baseada na formulação proposta por Gandini (2001), (equação 4.4), como

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \beta(t) + \frac{\Lambda(t)}{P_n(t)} \frac{dP_n(t)}{dt} - \frac{\lambda A_0}{P_n(t)} e^{-\lambda t} - \frac{\zeta[1 - P_n(t)]}{P_n(t)} - \frac{\Lambda(t) \tilde{Q}(t)}{P_n(t)} \\ & - \frac{\lambda}{P_n(t)} \left\{ \frac{\lambda A(t) - A^{(1)}(t)}{\lambda^2 A(t) - A^{(2)}(t)} A(t) - \frac{\lambda A(0) - A^{(1)}(0)}{\lambda^2 A(0) - A^{(2)}(0)} A(0) e^{-\lambda t} \right\}. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Para o formalismo proposto por Silva *et al.* (2011), equação (4.8), tem-se,

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \beta(t) + \frac{\Lambda(t)}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{\lambda A_0}{P(t)} e^{-\lambda t} - \Gamma - \frac{\Lambda(t) Q'(t)}{P(t)} \\ & - \frac{\lambda}{P(t)} \left\{ \frac{\lambda A(t) - A^{(1)}(t)}{\lambda^2 A(t) - A^{(2)}(t)} A(t) - \frac{\lambda A(0) - A^{(1)}(0)}{\lambda^2 A(0) - A^{(2)}(0)} A(0) e^{-\lambda t} \right\}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

5. Cálculo da reatividade para algumas variações da potência nuclear

5.1. Potência Linear

5.1.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

Durante a partida de um reator nuclear a sensibilidade do sistema de mediação pode não identificar o aumento da potência, assim uma inserção de reatividade brusca causará um crescimento instantâneo da potência, podendo causar um acidente no circuito primário (Zhang *et al.* 2008).

Para contornar esse problema deve-se inserir a reatividade de maneira suave até que o reator chegue a sua potência de operação. Para isto, consideramos uma variação linear da potência da forma:

$$P_n(t) = P_0 + wt, \quad (5.1)$$

a uma taxa $w = 0.001$. Substituindo a equação (5.1) na equação (2.53) pode-se escrever:

$$\rho(t) = \beta + \frac{\Lambda}{P_0 + wt} \frac{d(P_0 + wt)}{dt} - \frac{\beta P_0 e^{-\lambda t}}{P_0 + wt} - \frac{\lambda \beta}{P_0 + wt} \int_0^t (P_0 + wt') e^{-\lambda(t-t')} dt' - \frac{\zeta(1 - (P_0 + wt))}{P_0 + wt} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.2)$$

Resolvendo a integral da equação (5.2),vem:

$$\rho(t) = \beta + \frac{w\Lambda}{P_0 + wt} - \frac{\lambda\beta}{P_0 + wt} \left(\frac{P_0 + wt}{\lambda} \right) + \frac{\beta w}{\lambda(P_0 + wt)} - \frac{\beta w e^{-\lambda t}}{\lambda(P_0 + wt)} - \frac{\zeta(1 - (P_0 + wt))}{P_0 + wt} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.3)$$

Reescrevendo a equação (5.3), obtém-se:

$$\rho(t) = \frac{w\Lambda}{P_0 + wt} + (1 - e^{-\lambda t}) \frac{\beta w}{\lambda(P_0 + wt)} - \frac{\zeta(1 - (P_0 + wt))}{P_0 + wt} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.4)$$

Utilizando o método das derivadas, podemos escrever:

$$\rho(t) = \beta + \frac{\Lambda w}{P_0 + wt} - \frac{\beta P_0}{P_0 + wt} e^{-\lambda t} - \frac{\zeta(1 - (P_0 + wt))}{P_0 + wt} + \frac{\lambda\beta}{P_0 + wt} \left\{ \frac{\lambda(P_0 + wt) - w}{\lambda} - \frac{\lambda P_0 - w}{\lambda} e^{-\lambda t} \right\} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.5)$$

Manipulando a equação (5.5) vem;

$$\rho(t) = \frac{w\Lambda}{P_0 + wt} + (1 - e^{-\lambda t}) \frac{\beta w}{\lambda(P_0 + wt)} - \frac{\zeta(1 - (P_0 + wt))}{P_0 + wt} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.6)$$

Pode-se observar que a solução encontrada pelo método das derivadas, equação (5.6), é exatamente a mesma que a solução encontrada através da resolução do histórico de potência, equação (5.4).

5.1.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Analisando o comportamento da reatidade através da variação linear da potência, tem-se, fazendo $P(t) = P_0 + wt$, na equação (2.54),

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \frac{\Lambda w}{P_0 + wt} - \frac{\beta P_0}{P_0 + wt} e^{-\lambda t} - \frac{\lambda \beta}{P_0 + wt} \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} (P_0 + wt') dt' - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.7)$$

Resolvendo a integral da equação (5.7), obtém-se:

$$\rho(t) = \Gamma + \frac{w\Lambda}{P_0 + wt} + (1 - e^{-\lambda t}) \frac{\beta w}{\lambda(P_0 + wt)} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.8)$$

Utilizando-se o método das derivadas tem-se;

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \frac{\Lambda w}{P_0 + wt} - \frac{\beta P_0}{P_0 + wt} e^{-\lambda t} - \frac{\beta}{P_0 + wt} \left\{ \frac{\lambda(P_0 + wt) - w}{\lambda} - \frac{\lambda P_0 - w}{\lambda} e^{-\lambda t} \right\} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.9)$$

Realizando as simplificações necessárias, vem:

$$\rho(t) = \Gamma + \frac{w\Lambda}{P_0 + wt} + \frac{w\beta}{\lambda(P_0 + wt)} (1 - e^{-\lambda t}) - \frac{\Lambda Q}{P_0 + wt}. \quad (5.10)$$

Novamente, as expressões encontradas pela a solução da integral do histórico de potência, equação (5.8), é exatamente a mesma que a expressão final utilizando o método das derivadas, equação (5.10).

5.2. Potência Constante

Todo reator nuclear é projetado para operar em determinado nível de potência nuclear, ou seja, durante sua operação normal, o reator funciona a uma potência constante. Assim, é importante avaliar o comportamento da reatividade de um reator nessas condições.

5.2.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

Então, sendo $P_n(t) = P_0$ o segundo termo da equação (2.53) desaparece e assim pode-se escrever:

$$\rho(t) = \beta - \beta e^{-\lambda t} - \lambda \beta \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' - \frac{\zeta(1-P_0)}{P_0} - \frac{\Lambda Q}{P_0}. \quad (5.11)$$

Resolvendo a integral da equação (5.11), obtém-se:

$$\rho(t) = -\frac{\zeta(1-P_0)}{P_0} - \frac{\Lambda Q}{P_0}. \quad (5.12)$$

Aplicando o método das derivadas, tem-se;

$$\begin{aligned} \rho(t) &= \beta - \beta e^{-\lambda t} - \frac{\zeta(1-P_0)}{P_0} \\ \frac{\lambda \beta}{P_0} \left\{ \frac{\lambda P_0}{\lambda^2 P_0} P_0 - \frac{\lambda P_0}{\lambda^2 P_0} P_0 e^{-\lambda t} \right\} &= \frac{\Lambda Q}{P_0}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Assim, vem;

$$\rho(t) = -\frac{\zeta(1-P_0)}{P_0} - \frac{\Lambda Q}{P_0}. \quad (5.14)$$

Mais uma vez, observa-se que as equações finais para a reatividade para potência constante são idênticas, tanto resolvendo a integral do histórico de potência, equação (5.12), quanto utilizando o método das derivadas, equação (5.14).

5.2.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Avaliando a operação do reator a uma potência constante, ou seja, substituindo $P(t) = P_0$, na equação (2.54), tem-se:

$$\rho(t) = \beta + \Gamma - \beta e^{-\lambda t} - \lambda \beta \int_0^t e^{-\lambda(t-t')} dt' - \frac{\Lambda Q}{P_0}. \quad (5.15)$$

Novamente, resolvendo a integral da equação (5.15), tem-se, segundo o formalismo de Silva *et al*:

$$\rho(t) = \Gamma - \frac{\Lambda Q}{P_0}. \quad (5.16)$$

Já através do uso do método das derivadas, obtém-se;

$$\rho(t) = \beta + \Gamma - \beta e^{-\lambda t} - \frac{\lambda \beta}{P_0} \left\{ \frac{\lambda P_0}{\lambda^2 P_0} P_0 - \frac{\lambda P_0}{\lambda^2 P_0} P_0 e^{-\lambda t} \right\} - \frac{\Lambda Q}{P_0}. \quad (5.17)$$

Realizando as simplificações necessárias, temos;

$$\rho(t) = \Gamma - \frac{\Lambda Q}{P_0}. \quad (5.18)$$

Novamente observa-se que as equações (5.16) e (5.18) para a reatividade são idênticas independente do método de solução abordado.

5.3. Potência Exponencial

5.3.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

Outra variação característica da potência nuclear é a forma exponencial. Assim, supondo uma variação deste tipo para potência na equação (2.53) pode-se avaliar o comportamento cinético do reator. Nessas condições, substituindo $P(t) = P_0 e^{\alpha t}$, na equação (2.53), obtém-se

$$\rho(t) = \beta + \Lambda\alpha - \beta e^{-(\lambda+\alpha)t} - \lambda\beta e^{-\lambda t} \int_0^t e^{(\alpha+\lambda)t'} dt' - \frac{\zeta(1 - P_0 e^{-\alpha t})}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.19)$$

Resolvendo a integral, tem-se

$$\rho(t) = \beta + \Lambda\alpha - \beta e^{-(\lambda+\alpha)t} - \frac{\lambda\beta}{\alpha + \lambda} + \frac{\lambda\beta e^{-(\lambda+\alpha)t}}{\alpha + \lambda} - \frac{\zeta(1 - P_0 e^{-\alpha t})}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.20)$$

Agora, pelo método das derivadas, podemos escrever;

$$\rho(t) = \beta + \frac{\Lambda\alpha P_0 e^{\alpha t}}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\beta P_0 e^{-\lambda t}}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\zeta(1 - P_0 e^{-\alpha t})}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\lambda\beta}{e^{\alpha t}} \left\{ \left(\frac{\lambda P_0 e^{\alpha t} - \alpha P_0 e^{\alpha t}}{\lambda^2 P_0 e^{\alpha t} - \alpha^2 P_0 e^{\alpha t}} \right) P_0 e^{\alpha t} - \left(\frac{\lambda P_0 - \alpha P_0}{\lambda^2 P_0 - \alpha^2 P_0} \right) P_0 e^{-\lambda t} \right\} - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.21)$$

Realizando as simplificações necessárias, vem;

$$\rho(t) = \beta + \Lambda\alpha - \beta e^{-(\lambda+\alpha)t} - \frac{\lambda\beta}{\alpha + \lambda} + \frac{\lambda\beta e^{-(\lambda+\alpha)t}}{\alpha + \lambda} - \frac{\zeta(1 - P_0 e^{-\alpha t})}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.22)$$

As expressões obtidas utilizando-se tanto o método das derivadas quando resolvendo a integral do histórico de potência são idênticas.

5.3.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Procedendo de maneira análoga à seção anterior e substituindo uma variação exponencial, temos para o formalismo de Silva *et al.* (2011)

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \Lambda\alpha - \beta e^{-(\lambda+\alpha)t} - \frac{\lambda\beta e^{-\lambda t}}{e^{\alpha t}} \int_0^t e^{(\alpha+\lambda)t'} dt' - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.23)$$

Resolvendo a integral da equação (5.23), vem;

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \Lambda\alpha - \beta e^{-(\lambda+\alpha)t} - \frac{\lambda\beta}{(\lambda + \alpha)} + \frac{\lambda\beta e^{-(\lambda+\alpha)t}}{(\lambda + \alpha)} - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.24)$$

Novamente, utilizando o método das derivadas, obtém-se;

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \frac{\Lambda \alpha P_0 e^{\alpha t}}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\beta P_0 e^{-\lambda t}}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{\lambda \beta}{e^{\alpha t}} \left\{ \left(\frac{\lambda P_0 e^{\alpha t} - \alpha P_0 e^{\alpha t}}{\lambda^2 P_0 e^{\alpha t} - \alpha^2 P_0 e^{\alpha t}} \right) P_0 e^{\alpha t} - \left(\frac{\lambda P_0 - \alpha P_0}{\lambda^2 P_0 - \alpha^2 P_0} \right) P_0 e^{-\lambda t} \right\} - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.25)$$

Manipulando a equação acima, chega-se à:

$$\rho(t) = \beta + \Gamma + \Lambda \alpha - \beta e^{-(\lambda + \alpha)t} - \frac{\lambda \beta}{(\lambda + \alpha)} + \frac{\lambda \beta e^{-(\lambda + \alpha)t}}{(\lambda + \alpha)} - \frac{\Lambda Q}{P_0 e^{\alpha t}}. \quad (5.26)$$

5.4. Variação Genérica da Potência

Nesta seção será avaliado o comportamento das equações da cinética pontual para sistemas subcríticos em caso de funcionamento anormal do reator. Inicialmente o reator será avaliado com uma rampa da potência, depois operando em uma queda súbita de potência e em outros momentos pode ocorrer uma grande elevação de potência. Para isso, a variação da potência foi simulada durante seis horas da seguinte maneira

$$P(t) = \begin{cases} P_0 + w_1 t, & 0 < t \leq 1h \\ 0, & 1 < t \leq 2h \\ P_0 + w_2 t, & 2 < t \leq 4h \\ P_0 + w_4 t, & 4 < t \leq 5h \\ P_0 + w_5 t, & 5 < t \leq 6h \end{cases} \quad (5.27)$$

onde $w_1 = 0,001$ W/s, $w_2 = 0,01$ W/s, $w_4 = 0,005$ W/s, $w_5 = 0,005$ W/s

Portanto, admitindo que em todas as variações de potência, pode-se utilizar o resultado da seção 5.1.1, assim, para o formalismo proposto por Gandini, à reatividade se escreve da seguinte forma;

$$\rho(t) = \begin{cases} \frac{w_1\Lambda}{P_0 + w_1t} + \frac{(1-e^{-\lambda t})\beta w_1}{\lambda(P_0 + w_1t)} - \frac{\zeta(1-(P_0 + w_1t))}{P_0 + w_1t} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_1t}, & 0 < t \leq 1h \\ -\zeta, & 1 < t \leq 2h \\ \frac{w_2\Lambda}{P_0 + w_2t} + \frac{(1-e^{-\lambda t})\beta w_2}{\lambda(P_0 + w_2t)} - \frac{\zeta \cdot (1-(P_0 + w_2t))}{P_0 + w_2t} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_2t}, & 2 < t \leq 4h \\ \frac{w_4\Lambda}{P_0 + w_4t} + \frac{(1-e^{-\lambda t})\beta w_4}{\lambda(P_0 + w_4t)} - \frac{\zeta(1-(P_0 + w_4t))}{P_0 + w_4t} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_4t}, & 4 < t \leq 5h \\ \frac{w_5\Lambda}{P_0 + w_5t} + \frac{(1-e^{-\lambda t})\beta w_5}{\lambda(P_0 + w_5t)} - \frac{\zeta(1-(P_0 + w_5t))}{P_0 + w_5t} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_5t}, & 5 < t \leq 6h \end{cases} \quad (5.28)$$

Já para o formalismo proposto por Silva *et al.* tem-se, utilizando o resultado da seção 5.1.2.

$$\rho(t) = \begin{cases} \Gamma + \frac{w_1\Lambda}{P_0 + w_1t} + (1-e^{-\lambda t})\frac{\beta w_1}{\lambda(P_0 + w_1t)} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_1t}, & 0 < t \leq 1h \\ \Gamma, & 1 < t \leq 2h \\ \Gamma + \frac{w_2\Lambda}{P_0 + w_2t} + (1-e^{-\lambda t})\frac{\beta w_2}{\lambda(P_0 + w_2t)} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_2t}, & 2 < t \leq 4h \\ \Gamma + \frac{w_4\Lambda}{P_0 + w_4t} + (1-e^{-\lambda t})\frac{\beta w_4}{\lambda(P_0 + w_4t)} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_4t}, & 4 < t \leq 5h \\ \Gamma + \frac{w_5\Lambda}{P_0 + w_5t} + (1-e^{-\lambda t})\frac{\beta w_5}{\lambda(P_0 + w_5t)} - \frac{\Lambda Q}{P_0 + w_5t}, & 5 < t \leq 6h \end{cases} \quad (5.29)$$

6. Variações da potência nuclear com Dependência temporal de β e Λ

Neste capítulo será suposto que tanto a fração de nêutrons retardados quanto e o tempo médio de geração de nêutrons variem linearmente de acordo com

$$\beta(t) = \beta_0 + Bt \quad (6.1)$$

e

$$\Lambda(t) = \Lambda_0 + ct, \quad (6.2)$$

onde o coeficiente linear β_0 tem valor 0,00706, o coeficiente angular B é $-2,17857 \times 10^{-7}$ pcm. Já os valores dos coeficientes da variação do tempo médio de geração de nêutrons são $\Lambda_0 = 1,1661 \times 10^{-5}$ s e $c = -7,14286 \times 10^{-10}$ s.

6.1. Potencia Linear

6.1.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

No processo de obtenção da equação (5.6) não foi considerado nenhuma variação temporal dos parâmetros β e Λ . Para se ter um resultado mais próximo do funcionamento real de um reator, considera-se, agora, que a fração de nêutrons retardados e o tempo médio de geração de nêutrons variem linearmente com o tempo de acordo com (6.1) e (6.2). Assim, substituindo essas equações na equação (4.32), obtém-se,

$$\begin{aligned}
\rho(t) = & \beta_0 + Bt + \frac{(\Lambda_0 + ct)w}{P_0 + wt} - \frac{\beta_0 P_0 e^{-\lambda t}}{P_0 + wt} - \frac{\zeta(1 - (P_0 + wt))}{P_0 + wt} \\
& - \lambda(\beta_0 + Bt) \left\{ \frac{\lambda(\beta_0 P_0 + \beta_0 wt + P_0 Bt + Bwt^2) - \beta_0 w - P_0 B - 2Bwt}{\lambda^2(\beta_0 P_0 + \beta_0 wt + P_0 Bt + Bwt^2) - 2Bw} \right\} \quad (6.3) \\
& + \lambda\beta_0 P_0 \left\{ \frac{\lambda\beta_0 P_0 - \beta_0 w + P_0 B}{\lambda^2\beta_0 P_0 - 2Bw} e^{-\lambda t} \right\} - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0 + wt}.
\end{aligned}$$

6.1.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Repetindo o procedimento da seção anterior, ou seja, substituindo as equações (6.1), (6.2) e (5.1), agora na equação(4.33), vem

$$\begin{aligned}
\rho(t) = & \beta_0 + Bt + \frac{(\Lambda_0 + ct)w}{P_0 + wt} - \frac{\beta_0 P_0 e^{-\lambda t}}{P_0 + wt} - \Gamma \\
& - \lambda(\beta_0 + Bt) \left\{ \frac{\lambda(\beta_0 P_0 + \beta_0 wt + P_0 Bt + Bwt^2) - \beta_0 w - P_0 B - 2Bwt}{\lambda^2(\beta_0 P_0 + \beta_0 wt + P_0 Bt + Bwt^2) - 2Bw} \right\} \quad (6.4) \\
& + \lambda\beta_0 P_0 \left\{ \frac{\lambda\beta_0 P_0 - \beta_0 w + P_0 B}{\lambda^2\beta_0 P_0 - 2Bw} e^{-\lambda t} \right\} - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0 + wt}.
\end{aligned}$$

6.2. Potência Constante

6.2.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

Nesta seção considera-se uma situação que a potência nuclear permaneça constante durante a operação do reator. Assim, Substituindo as equações (6.1) e (6.2) equação (4.32), obtém-se,

$$\rho(t) = (\beta_0 + Bt)(1 - P_0) - e^{-\lambda t} \left(P_0 - \lambda \beta_0 - \frac{B}{\lambda} \right) - \frac{P_0 B}{\lambda} - \frac{\zeta(1 - P_0)}{P_0} - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0}. \quad (6.5)$$

6.2.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Novamente, repetindo o procedimento da seção anterior, porém substituindo as equações (6.1), (6.2) e (5.1), na equação (4.33) tem-se

$$\rho(t) = (\beta_0 + Bt)(1 - P_0) - e^{-\lambda t} \left(P_0 - \lambda \beta_0 - \frac{B}{\lambda} \right) - \frac{P_0 B}{\lambda} - \Gamma - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0}. \quad (6.6)$$

6.3. Potência Exponencial

6.3.1. Teoria Heurística de Perturbação Generalizada (HGPT)

Supondo que a potência varie de acordo com $P(t) = P_0 e^{\alpha t}$, obtém-se, substituindo as equações (6.1), (6.2) e a variação exponencial da potência nuclear na equação (4.32) vem,

$$\begin{aligned} \rho(t) = & (\beta_0 + Bt) + (\Lambda_0 + ct)\alpha - \frac{\zeta(1 - P_0 e^{\alpha t})}{P_0 e^{\alpha t}} - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0} \\ & - \lambda \left[\frac{\lambda\beta_0 + \lambda Bt - \beta_0\alpha - B - B\alpha t}{\lambda^2\beta_0 + \lambda^2 Bt - \beta_0\alpha^2 - 2\beta_0\alpha - Bt\alpha^2} (\beta_0 + Bt) \right] \\ & + \lambda\beta_0 e^{-(\lambda+\alpha)t} \left[\frac{\lambda - \alpha + BP_0}{\lambda^2 - \alpha^2 - 2BP_0\alpha} - 1 \right] \end{aligned} \quad (6.7)$$

6.3.2. Termo Adjunto de Fonte (TAF)

Agora, substituindo as equações (6.1), (6.2) e a variação exponencial da potência nuclear na equação (4.33) vem,

$$\begin{aligned} \rho(t) = & (\beta_0 + Bt) + (\Lambda_0 + ct)\alpha - \Gamma - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0} \\ & - \lambda \left[\frac{\lambda\beta_0 + \lambda Bt - \beta_0\alpha - B - B\alpha t}{\lambda^2\beta_0 + \lambda^2 Bt - \beta_0\alpha^2 - 2\beta_0\alpha - Bt\alpha^2} (\beta_0 + Bt) \right] \\ & + \lambda\beta_0 e^{-(\lambda+\alpha)t} \left[\frac{\lambda - \alpha + BP_0}{\lambda^2 - \alpha^2 - 2BP_0\alpha} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (6.8)$$

6.3.3. Variação Genérica da Potência

Repetindo o procedimento da seção 5.4, temos uma variação de potência dada por

$$P(t) = \begin{cases} P_0 + w_1 t, & 0 < t \leq 1h \\ 0 & , \quad 1 < t \leq 2h \\ P_0 + w_2 t, & 2 < t \leq 4h \\ P_0 + w_4 t, & 4 < t \leq 5h \\ P_0 + w_5 t, & 5 < t \leq 6h \end{cases} \quad (6.9)$$

Assim, para o formalismo proposto por Gandini, a reatividade se torna;

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \beta_0 + Bt + \frac{(\Lambda_0 + ct)w_i}{P_0 + w_i t} - \frac{\beta_0 P_0 e^{-\lambda t}}{P_0 + w_i t} - \frac{\zeta(1 - (P_0 + w_i t))}{P_0 + w_i t} \\ & - \lambda(\beta_0 + Bt) \left\{ \frac{\lambda(\beta_0 P_0 + \beta_0 w_i t + P_0 Bt + Bw_i t^2) - \beta_0 w_i - P_0 B - 2Bw_i t}{\lambda^2(\beta_0 P_0 + \beta_0 w_i t + P_0 Bt + Bw_i t^2) - 2Bw_i} \right\} \\ & + \lambda\beta_0 P_0 \left\{ \frac{\lambda\beta_0 P_0 - \beta_0 w_i + P_0 B}{\lambda^2\beta_0 P_0 - 2Bw_i} e^{-\lambda t} \right\} - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0 + w_i t}, \end{aligned} \quad (6.10)$$

onde w_i assume os seguintes valores, $w_1 = 0,001$, $w_2 = 0,01$ ou $w_4 = 0,005$. Já para o formalismo proposto por Silva *et al.* (2011) tem-se:

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \beta_0 + Bt + \frac{(\Lambda_0 + ct)w_i}{P_0 + w_i t} - \frac{\beta_0 P_0 e^{-\lambda t}}{P_0 + w_i t} - \Gamma \\ & - \lambda(\beta_0 + Bt) \left\{ \frac{\lambda(\beta_0 P_0 + \beta_0 w_i t + P_0 Bt + Bw_i t^2) - \beta_0 w_i - P_0 B - 2Bw_i t}{\lambda^2(\beta_0 P_0 + \beta_0 w_i t + P_0 Bt + Bw_i t^2) - 2Bw_i} \right\} \\ & + \lambda\beta_0 P_0 \left\{ \frac{\lambda\beta_0 P_0 - \beta_0 w_i + P_0 B}{\lambda^2\beta_0 P_0 - 2Bw_i} e^{-\lambda t} \right\} - \frac{(\Lambda_0 + ct)Q}{P_0 + w_i t}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

7. Simulação Numérica

O método de Monte Carlo pode ser caracterizado como uma técnica de cálculo de força bruta, que é bem adequado para problemas complicados que consistem de várias subtarefas bem definidas. É um método simples e intuitivo e mantém uma estreita relação com o problema que está sendo resolvido.

Atualmente o método de Monte Carlo é amplamente utilizado em vários campos, como na física, matemática, economia e engenharia. Uma de suas primeiras aplicações práticas foi na modelagem de problemas de transporte de partículas (Leppänen, 2007).

O método de cálculo foi chamada de "Monte Carlo" pelos cientistas Stanislav Ulam, John von Neumann e Metropolis Nicholas no final de 1940, quando este método foi usado para resolver problemas de transporte de partículas na pesquisa de armas nucleares. As raízes do desenvolvimento da teoria moderna da probabilidade e estatística data do século 19. Porém, a primeira publicação registrada que aborda este método data de 1949 (Yoriyaz, 2009).

O sucesso da aplicação do método Monte Carlo (MMC) pelos cientistas de Los Alamos se decorreu devido à computação numérica. De fato, mesmo se todos os aspectos teóricos fossem resolvidos, a utilização em grande escala do método não seria possível sem esta ferramenta.

O método Monte Carlo é muito diferente dos métodos de transporte determinísticos que geralmente baseiam-se na solução da equação de transporte de nêutrons. Assim, para fazer com que o problema seja passível de uma solução computacional, é necessária a realização de uma discretização das variáveis, tanto no espaço quanto na energia. A força do método de Monte Carlo reside na capacidade em calcular estimativas estatísticas para taxas de reação, sem necessitar da solução explícita para a distribuição do fluxo. Além disso, a capacidade de lidar com variações complexas das variáveis espaciais e de energia é o que torna a alternativa do MMC mais atraente que os métodos de transporte determinísticos (Leppänen, 2007).

Mesmo que a abordagem determinista tenha demonstrado sua viabilidade para simular reatores críticos, ela é amplamente utilizada. Porém, esta metodologia apresenta alguns inconvenientes que se tornam importantes no caso de um reator subcrítico com um acelerador de partículas acoplado como, por exemplo, a introdução de uma aproximação, devido à conversão do espectro de energia dos nêutrons para

uma grade de energia e espaço para os códigos que utilizam uma abordagem multigrupo (Kady *et al.*, 2001).

Por utilizar seções de choques pontuais, a simulação Monte Carlo é livre de quase todos os inconvenientes que aparecem nas simulações determinísticas. Porém, sua precisão varia inversamente com a raiz quadrada do número de eventos processados. Isso representa um problema potencialmente grande de tempo de processamento, em particular quando a simulação abrange toda a vida útil da produção de energia do sistema.

No método Monte Carlo, para a simulação de transporte de radiação, as respostas são obtidas simulando partículas individuais e gravando alguns aspectos de seu comportamento médio. Se os modelos dessas interações utilizados nas simulações são suficientemente próximos da realidade, o resultado estará próximo do processo real.

Os componentes importantes de métodos de simulação de Monte Carlo são: as funções de densidade de probabilidade; a geração de números aleatórios; as regras de amostragem; a computação de resultados; as estimativas de erros e a redução de variância, conforme mostra a Figura 7.1. Além disso, os algoritmos eficientes para paralelização são úteis para a implementação do método de Monte Carlo para uso em cluster de computadores (Grisell, 2004).

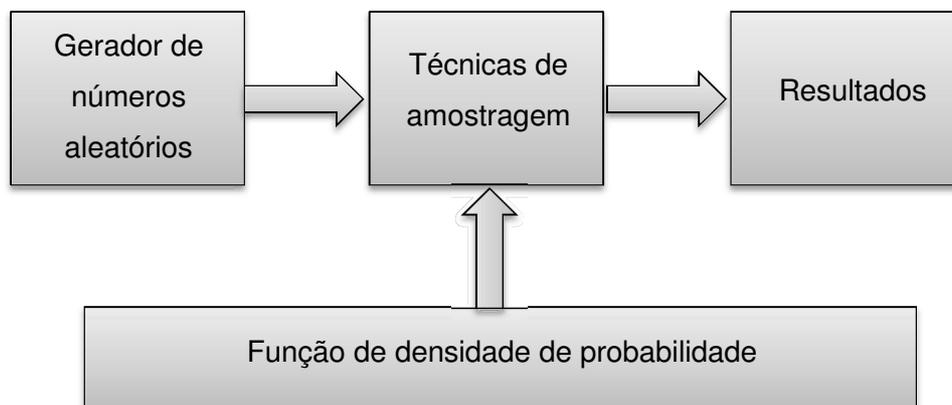


Figura 7.1. Esquema simplificado do processo de simulação via MMC. Retirado de Yoriyaz, 2009.

O método de Monte Carlo utiliza além do teorema do limite central, modelos físicos de interação, ou seja, um conjunto de seções de choque diferenciais para os mecanismos de interação relevantes do sistema a ser simulado (Salvat *et al.*, 2003).

Essas seções de choque diferenciais determinam as funções de distribuição de probabilidades de variáveis aleatórias.

Esses conjuntos de funções de distribuição de probabilidade caracterizam uma história e determinam o tipo de interação sofrida pela partícula, por exemplo, se a partícula sofrerá uma mudança de energia e de direção de propagação, se ela apenas sofrerá algum desvio angular ou se ocasionará fissão.

Caso o número de histórias (uma história inclui desde a geração de uma partícula até sua 'fuga' ou absorção, além de todas as outras partículas que podem ser produzidas, por exemplo, através da fissão) seja suficientemente grande, informações quantitativas sobre o processo de transporte podem ser obtidas simplesmente por uma média de mais histórias simuladas.

Este método é extremamente útil em problemas complexos que não podem ser modelados por códigos computacionais que utilizam métodos determinísticos. Outra grande aplicação do método Monte Carlo é em experimentos em que os resultados são de difícil medição.

Ao se comparar os métodos MC e de variáveis discretas, normalmente se diz que o MC resolve a equação de transporte na sua forma integral, enquanto o método de variáveis discretas resolve a equação na sua forma integro-diferencial. Porém as duas equações são formas diferentes da mesma equação, e assim, quando se resolve uma obtém-se a solução da outra (Mosteller *et al.* 2003).

Como o método MC resolve o problema simulando histórias das partículas não se torna necessário escrever a equação de transporte de nêutrons. No entanto, pode-se chegar a uma equação que descreva a densidade de probabilidade das partículas para o problema, e esta acaba sendo a equação de transporte na sua forma integral (Vaz, 2010).

A simulação Monte Carlo (MC) é baseada em geração de números aleatórios de uma distribuição uniforme gerando variáveis aleatórias para estabelecer outras funções de distribuição. Assim os números aleatórios ou pseudoaleatórios são à base do método de MC, pois estes números realizam todo o controle de decisão. Isso torna essencial a sub-rotina de geração de números aleatórios para qualquer simulador baseado no método de Monte Carlo. As sub-rotinas de geração de números aleatórios se baseiam em algoritmos matemáticos específicos para garantir que os números sorteados são realmente aleatórios, pois estes números devem, em teoria, ser igualmente prováveis em um sorteio dentro de um intervalo definido.

As variáveis aleatórias são uma quantidade que resultam de processos repetitivos e cujos valores reais não podem ser previsto com certeza. No mundo real a aleatoriedade se origina de fatores incontrolláveis (por exemplo, jogos de azar) ou da

natureza quântica de sistemas ou processos (por exemplo, desintegração nuclear). Nos computadores as variáveis randômicas são geradas por transformações numéricas de números randômicos.

O objetivo da simulação MC é fornecer informações precisas e detalhadas em três dimensões, dependente do tempo, tanto para partículas carregadas quanto para partículas neutras. Por este motivo o método de Monte Carlo é largamente utilizado na solução de problemas envolvendo processos estatísticos. Pode ser empregado na física de reatores devido à característica estocástica da emissão de radiação e transporte de partículas.

A carga computacional do método de Monte Carlo continua sendo um empecilho para as simulações de modelagem de sistemas nucleares, devido ao alto tempo de processamento computacional (Liu *et al.*, 2011) e a alta demanda de memória, pois para solucionar o problema de transporte de energia é necessário monitorar as trajetórias de vários nêutrons, seu respectivo histórico e sua multiplicação até absorção ou fuga de todas as partículas geradas por essa partícula.

Mesmo assim, o uso do método de Monte Carlo para a simulação do transporte de partículas tornou-se bastante popular, pois a alta demanda de processamento e de memória pode ser contornada se for utilizado um sistema de processamento distribuído com vários processadores, possibilitando diminuir o tempo de simulação mesmo em modelagem de geometrias complexas. Na prática, com o aumento de processadores resolvendo o mesmo problema costuma-se aumentar a estatística a ser simulada para a obtenção de resultados mais precisos com o mesmo tempo de simulação anterior.

7.1. Funções Densidade de Probabilidades

Para uma variável aleatória discreta, a função de probabilidade ($f(x)$) fornece diretamente a probabilidade do valor que a variável aleatória assume. Já para as variáveis aleatórias contínuas, a função de probabilidade em um intervalo é chamada de função de densidade de probabilidade.

Esta função não fornece diretamente as probabilidades dos valores que as variáveis aleatórias podem assumir. Porém, a área sob o gráfico da função de

densidade de probabilidade, correspondente a um dado intervalo, a probabilidade de que a variável aleatória contínua assuma um valor neste intervalo. Ou seja, quando calculamos as probabilidades para as variáveis aleatórias contínuas, estamos calculando a probabilidade de que a variável aleatória assuma qualquer valor em um intervalo. Assim, a probabilidade de qualquer valor particular da variável aleatória contínua é zero, pois a área sob o gráfico de $f(x)$ em qualquer ponto em particular é zero.

A distribuição de probabilidade de uma variável aleatória contínua pode ser visualizada como uma forma de um histograma baseado em um grande número de observações. Este histograma é construído com as densidades de probabilidade.

Por exemplo, a Figura 7.2 mostra um histograma da massa, em quilogramas, de 25 lingotes de urânio (Lurie *et al*, 2011).

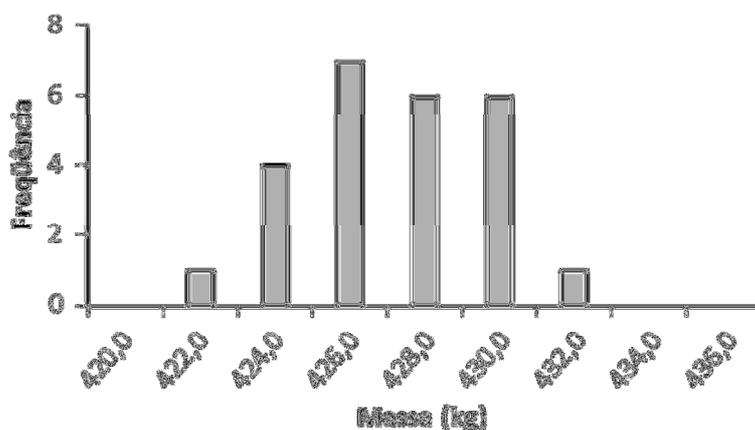


Figura 7.2: Histograma da massa (kg) de 25 lingotes de urânio

Se aumentarmos o número de amostras, teremos um histograma cada vez mais suave, a Figura 7.3 mostra o mesmo histograma com 150 observações.

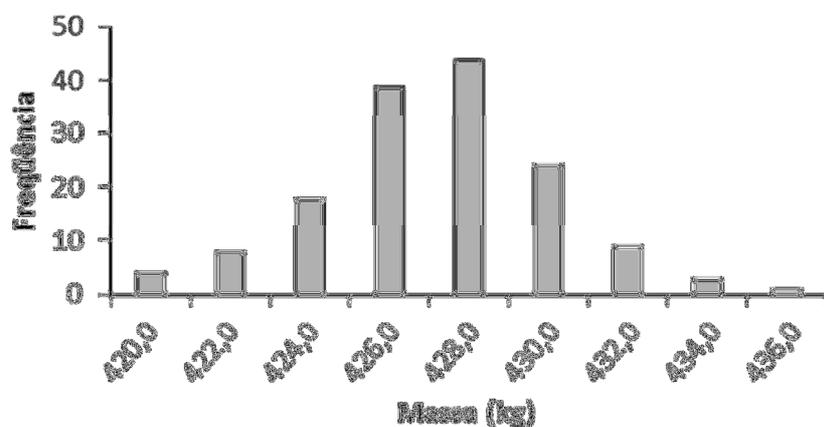


Figura 7.3: Histograma da massa, em quilogramas, de 150 lingotes de urânio

Se fizermos o número de amostras tender a infinito e o intervalo das classes tender a zero, no limite, o histograma tende a se “suavizar” e tomar a forma de uma curva teórica como mostra a Figura 7.4

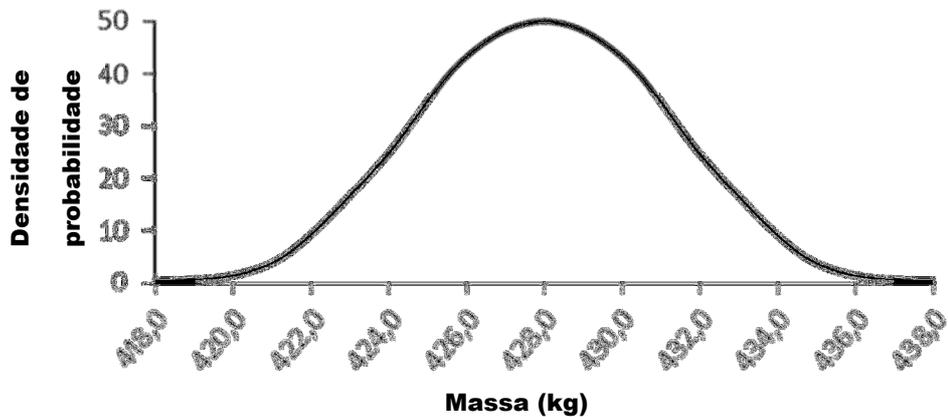


Figura 7.4: Curva de densidade de probabilidade para a variável aleatória contínua “massa dos lingotes de urânio”.

Como uma probabilidade é interpretada como a frequência relativa de um evento de ensaios independentes, a curva obtida na Figura 7.4 representa a maneira pela qual a probabilidade total é distribuída em relação aos possíveis valores que a variável aleatória “massa dos lingotes de urânio” pode assumir. Assim, a função densidade de probabilidade de uma variável aleatória contínua x é a função matemática $f(x)$ cujo gráfico produz a curva teórica que representa a maneira pela qual a probabilidade total é distribuída em relação à amplitude dos possíveis valores da variável aleatória contínua x .

As funções de densidades de probabilidades devem obedecer as seguintes condições:

$$f(x) > 0, \quad \forall x$$

$$F(x) = \int f(x') dx' = 1.$$

Dessa maneira, a probabilidade de uma variável x assumir os valores no intervalo (a,b) é:

$$P(a \leq x \leq b) = \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a).$$

Existem basicamente duas diferentes maneiras que podem ser utilizados na implementação da simulação do método Monte Carlo que são o método direto ou inverso e o método da rejeição. Nas próximas seções tem-se a descrição desses dois métodos.

7.2. Método direto ou inverso

Seja uma distribuição de probabilidade típica (por exemplo, a distribuição gaussiana) definida em um intervalo conhecido entre $[a, b]$. Como visto na seção anterior, pode-se definir a função de probabilidade acumulada desta distribuição como:

$$P(x) = \int_a^x p(x') dx'. \quad (7.1)$$

Criando uma nova variável aleatória através da transformação $\xi = P(x)$ e assumindo que a distribuição de probabilidade acumulada admite uma inversa, $P^{-1}(\xi)$, definida no intervalo de $(0,1)$, o valor de ξ é então definido como sendo igual à probabilidade cumulativa do evento, de modo que o valor correspondente de x pode ser calculado a partir da função inversa:

$$p_\xi(\xi) = p(x) \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^{-1} = p(x) \left(\frac{dP(x)}{dx} \right)^{-1}. \quad (7.2)$$

Assim, fica claro que ξ é um número aleatório e a variável x , que é definida por $x = P^{-1}(\xi)$, é aleatoriamente distribuída no intervalo (x_{\min}, x) . Note que x é a única raiz da equação

$$\xi = \int_{x_{\min}}^x p(x) dx. \quad (7.3)$$

Assim os valores amostrados de x desta forma são distribuídos de acordo com a $P(x)$.

A implementação do método direto de MC pode ser feita através do seguinte algoritmo, conforme mostrado na Figura 7.5.

1. Geração de um número aleatório ξ ;
2. Verificação de que x corresponde ao ξ sorteado;
3. Verificação de qual probabilidade correspondente ao x .

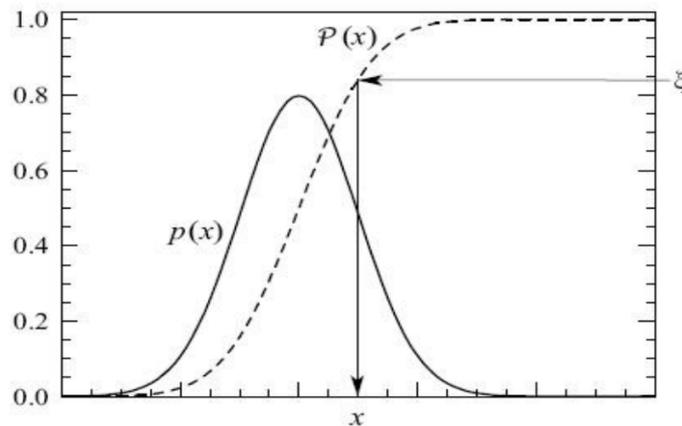


Figura 7.5 Sorteio de uma variável aleatória da distribuição $p(x)$ usando método inverso (Salvat, et al. 2003).

A solução através do método de MC da equação de transporte de nêutrons (equação (7.4)) pode ser feita utilizando o método direto, resolvendo-se as integrais, de acordo com (Vaz, 2009).

$$\Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int \left[\int \Psi(\vec{r}', E', \vec{\Omega}') C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \Omega | \vec{r}') dE' d^2\Omega' + Q(\vec{r}', E, \vec{\Omega}) \right] T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \Omega) d^3r'. \quad (7.4)$$

Com o termo de fonte podendo ser definido como:

$$Q(\vec{r}, R, \vec{\Omega}) = \begin{cases} S, & \text{Fonte fixa} \\ S + \int \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') F(E', \Omega' \rightarrow E, \Omega | r) dE' d^2\Omega', & \text{Fonte fixa + Fissão} \\ \frac{1}{k} \int \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') F(E', \Omega' \rightarrow E, \Omega | r) dE' d^2\Omega', & \text{Autovalor} \end{cases} \quad (7.5)$$

onde $S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ foi abreviado como S .

Assim, uma história ('trajetória') pode ser entendida como uma sequência de transição entre estados ($P_0, P_1, P_2, P_3, \dots$). Em cada ponto de colisão P_i , pode ocorrer variação da energia, de direções e ainda incluir a geração de novas partículas.

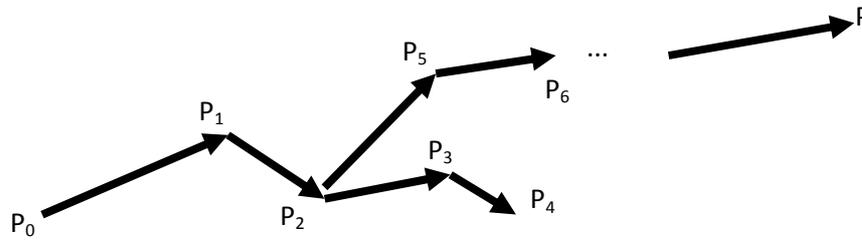


Figura 7.6 Representação da história de uma partícula

Então a equação de transporte pode ser escrita como (Vaz, 2009)

$$\Psi_i(P) = \int \int \int \dots \int \Psi_0(P_0) K(P_0 \rightarrow P_1) \dots K(P_{i-1} \rightarrow P) dp_0 dp_1 dp_2 \dots dp_{i-1}. \quad (7.6)$$

onde $K(P' \rightarrow P)$ é o kernel de transporte que é definido por

$$K(P' \rightarrow P) \equiv K(\vec{r}', E', \Omega' \rightarrow \vec{r}, E, \Omega) = C(E', \vec{\Omega}' \rightarrow E, \Omega | \vec{r}') T(\vec{r}' \rightarrow \vec{r} | E, \Omega). \quad (7.7)$$

7.3. Método da rejeição

Em muitos casos, tanto a função de distribuição cumulativa quanto sua inversa é de difícil obtenção ou não podem ser resolvidos. Exemplos de tais casos são a distribuição normal e a distribuição de Maxwell-Boltzmann. Há diversas variações numéricas para o uso do método de inversão que podem ser utilizados para amostrar os valores de qualquer tipo de distribuição, mas é muitas vezes mais eficaz ter uma abordagem completamente diferente (Leppänen, 2007).

O método da rejeição tem a vantagem que o procedimento de amostragem pode ser realizado utilizando apenas a função de distribuição de probabilidades da variável aleatória. De uma forma mais simples, uma constante $c \geq 1$ e uma outra função de densidade de $g(x)$ são atribuídos aos $f(x)$, de tal forma que:

$$f(x) \leq cg(x). \quad (7.1)$$

para todos os valores de x .

Os valores da variável aleatória ε serão aceitos se

$$\varepsilon < \frac{f(x)}{cg(x)}. \quad (7.2)$$

Se a desigualdade não é válida, o valor é descartado e o procedimento é repetido desde o início. Pode demonstrar-se que a distribuição dos valores aceitos pelo método seguem exatamente $f(x)$.

Uma aplicação que ilustra bem este método é o cálculo do número π . Para isso, suponha um círculo inscrito dentro de um quadrado de lado unitário. Se ao sortear N eventos forem contados quantos destes eventos estão dentro do círculo é possível calcular o valor de π .

Sabe-se que a integral entre os intervalos a e b é igual a um quarto da área do círculo (ver Figura 7.7). Desta maneira pode-se dizer que o número de pontos sorteados dentro da área total do círculo dividido pelo número total de sorteios é igual à área do círculo sobre a área do quadrado.

$$\frac{N_c}{N_t} = \frac{\pi r^2}{4r^2} = \frac{\pi}{4}.$$

onde N_c é o número de sorteios dentro do círculo e N_t é o total de números sorteados. Obviamente quanto maior for o total de número sorteados mais preciso será o resultado.

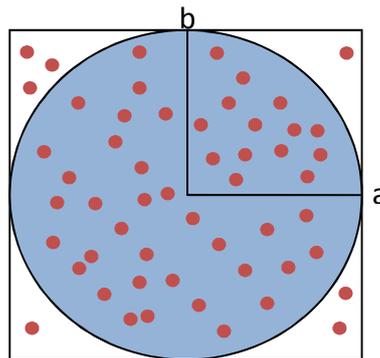


Figura 7.7. Cálculo do número π através do método direto de Monte Carlo.

Em geral, o método da rejeição é utilizado para a estimativa de eventos que são regidos por distribuições contínuas, ou seja, aqueles eventos que obedecem a uma curva de probabilidade.

É importante ressaltar que no método da rejeição é necessário o sorteio de dois números aleatórios. O primeiro (ε_1) para definir o valor da abcissa (x) e um segundo (ε_2) para definir o valor no eixo das ordenadas (Figura 7.8). Se ε_2 for menor que $f(\varepsilon_1)$ registra-se ε_1 como sendo um valor válido. Caso contrário ε_1 é rejeitado e ocorre o sorteio de outro número aleatório. O algoritmo do método da rejeição pode ser descrito como:

1. Sorteio do primeiro número aleatório (ε_1);
2. Verificação de qual é o valor da função para esse número aleatório;
3. Sorteio do segundo número aleatório;
4. Se $\varepsilon_2 < f(\varepsilon_1)$ registrar ε_1 como válido;
5. Senão, rejeitar ε_1 e voltar ao passo 1.

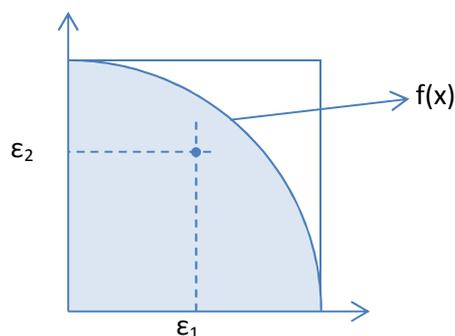


Figura 7.8 Processo de cálculo de π .

7.4. Métodos Monte Carlo para Reatores Subcríticos

Nas seções anteriores foi tratado das características básicas da simulação MC. Porém, para a simulação de um reator nuclear mais próxima do real é necessário que os códigos MC sejam capazes de acompanhar a queima dos combustíveis nucleares, chamados de códigos de depleção.

Atualmente existem vários códigos de depleção que utilizam o método Monte Carlo devido ao constante crescimento no desempenho dos computadores. Esses códigos geralmente são acoplados em um código genérico de simulação MC que resolve o transporte das partículas e podem fornecer o fluxo de partículas e as seções de choque microscópicas para os códigos de depleção.

Os códigos MC de depleção podem ser divididos em dois grupos de acordo com a metodologia de geração das seções de choque microscópicas. O primeiro grupo são os dos códigos que utilizam os resultados calculados diretamente pelo o código genérico MC. Já o segundo grupo, utiliza uma abordagem de multigrupo para o cálculo das seções de choque que é implementado pelo código de depleção. De acordo com esta metodologia, as taxas de reação são calculadas separadamente utilizando um pré-gerador de seções de choque multigrupo.

7.5. Conceito de Reatores ADS

Os reatores híbridos foram, inicialmente, considerados apenas para a queima de actínídeos, porém foi percebido que era possível aproveitar a queima dos actínídeos (transmutação), em um reator subcrítico, para a geração de eletricidade além da necessária para sustentar o acelerador de prótons.

Além disso, os reatores híbridos têm uma vantagem adicional de ser um sistema regenerador, ou seja, cria a possibilidade de regenerar combustível nuclear queimado em um reator térmico para ser reutilizado no mesmo após reprocessamento.

A Figura 7.9 mostra que os reatores regeneradores com acelerador (ABR – accelerator breeder reactor) podem não ser utilizados para a geração de eletricidade. Sua principal utilização seria para a produção de material físsil, principalmente ^{239}Pu (Lodhi *et al*, 2009). Para isso, esses reatores necessitam de energia elétrica para alimentar o acelerador de prótons, citado na Figura 7.10. Porém, os reatores híbridos podem ser dedicados tanto para a produção de energia como para a regeneração de material físsil, embora ambos os fenômenos ocorram sempre em um reator híbrido ele pode ser especializado para um desses objetivos de acordo com o cenário previsto para a busca da sustentabilidade da energia nuclear (Piera *et al*, 2010).

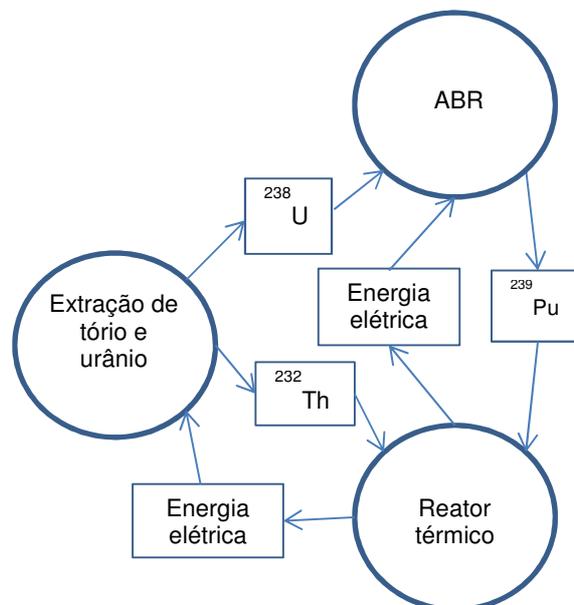


Figura 7.9. Sistema nuclear de energia que consiste em um reator reproduzidor e um térmico. Fonte: Lodhi *et al*, 2009

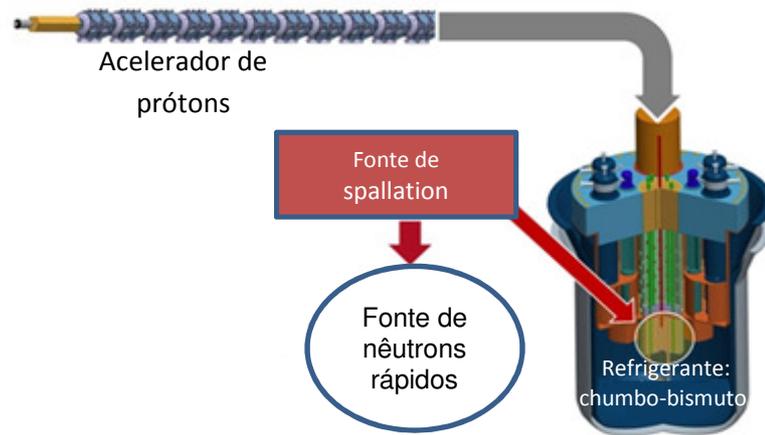


Figura 7.10. Esquema de um reator regenerador com acelerador. Fonte: <http://myrrha.sckcen.be/en/MYRRHA/ADS>

Tanto os reatores ADS como os ABR consistem em um acelerador de partículas de alta energia (prótons com cerca de 1 GeV de energia) que atingem um alvo com número atômico grande. Este choque gera nêutrons de alta energia capazes de tornar nuclídeos férteis em físséis.

Outra coisa interessante sobre esses reatores é que eles produzem vários isótopos da mesma maneira que os FBR. Em segundo lugar os reatores híbridos (ADS) operam com fator de multiplicação abaixo de 1 (geralmente entre 0,90 e 0,97). Em terceiro os ADS podem produzir combustível muito mais rápido que os FBR (Piera *et al*, 2010) pois liberam menos energia por fissão que os FBR.

Um dos principais objetivos do ADS é a queima de ^{232}Th para gerar uma grande quantidade de ^{233}U , embora ^{233}U puro tem aproximadamente a mesma massa crítica do plutônio (Lodhi *et al*, 2009).

8. Descrição e Validação dos Códigos Utilizados

Vários autores vêm propondo diferentes simulações MC para auxiliar o estudo de reatores ADS utilizando diferentes códigos (MCNPX, GEANT4, MCB). Porém estes modelos devem ter referências para poder se verificar, por exemplo, o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}), resultados dos cálculos de depleção e identificar as causas para as possíveis diferenças significativas entre os resultados simulados e os teóricos.

Idealmente, esses parâmetros deveriam ser comparados com dados experimentais. No entanto, há uma falta significativa de resultados físicos para núcleos de reatores rápidos concebidos para queimar actínídeos menores (AM) (Allen *et al.*, 2011).

Neste trabalho foram utilizados dois códigos MC distintos. Inicialmente, devido a grande quantidade de citações na literatura (Hashemi-Nezhad *et al.*, 2002; Sobolev *et al.*, 2003; Bomboni *et al.*, 2010; Fokau *et al.*, 2010; Talamo *et al.*, 2011, Pelowitz, 2008) foi utilizado o código MCNPX 2.6f e também o código SERPENT 1.1.17 que é uma ferramenta relativamente nova (Leppänen, 2007) comparada ao MCNPX.

O MCNPX é um código MC que vem sendo desenvolvido desde 1995 sendo escrito em FORTRAN e C. Assim, o MCNPX pode ser compilado para a utilização nas plataformas computacionais mais usadas (Windows, Linux e IOS). Além disso, o MCNPX pode ser usado com as bibliotecas de programação paralela (MPI).

O código é composto por aproximadamente 450 subrotinas, possui um desenvolvimento constante e atualmente é capaz de simular 34 partículas distintas. A versão 2.5.0 do MCNPX é utilizada atualmente por cerca de 2500 grupos no mundo, sendo distribuído pelo *Radiation Safety Information Computational Center* (RSICC) com base de dados sendo fornecida pela OECD/NEA.

Uma das grandes dificuldades do uso do MCNPX é a descrição da geometria que é feita através de uniões e interseções de superfícies básicas (plano, cilindro infinito, esfera, cone ou elipsoide). Assim, para simular uma vareta de combustível, deve-se criar, pelo menos, três superfícies distintas (2 planos e um cilindro infinito).

Além disso, deve-se criar uma célula para cada material utilizado. Esta célula carrega a informação do material que ela é composta, a densidade e os limites informados pelas uniões e/ou interseções das superfícies. Tanto as superfícies quanto as células são referenciados por números definidos pelo usuário.

Todas as superfícies permitem que as uniões e interseções sejam feitas em dois sentidos. Esses sentidos são informados pelos sinais negativos e positivos que devem acompanhar os números das superfícies.

O MCNPX ainda permite a definição da importância da partícula em cada célula, isso é útil quando se quer excluir uma ou mais partículas. Caso a importância de nêutrons seja definida como zero, qualquer nêutron que entrar nesta célula será eliminado da simulação. Isto é um artifício que delimita a área de atuação das partículas para não termos simulações de duração “infinita” ou perder tempo computacional em partículas que já saíram do sistema.

Também é possível definir células sem nenhum material, para isso basta colocar o número zero no lugar do número do material e não informar a densidade do mesmo. Neste caso o código irá interpretar o conteúdo da célula como sendo vácuo.

O MCNPX não fornece ferramenta gráfica para a edição de geometria, porém existem programas que realizam a leitura do arquivo e permitem a sua visualização. O que MCNPX faz é uma verificação básica da geometria em busca de erros. Em caso de erros de geometria, o MCNPX não realiza a simulação ou a simulação pode ser abortada se o código computar várias partículas perdidas (partículas que “saem” da geometria).

O lado positivo do MCNPX é a grande quantidade de elementos e de isótopos disponíveis para a simulação, devido o uso da biblioteca ENDF que é mantida pela agência internacional de energia atômica. Para os elementos ou isótopos que não existem nas bibliotecas o MCNPX realiza a simulação utilizando modelos físicos. Isto proporciona uma grande flexibilidade na simulação. Além disso, o MCNPX traz bibliotecas de espalhamento térmico que podem ser usadas nos materiais utilizados como moderadores.

O outro código MC utilizado foi o SERPENT. Este código é específico para simulação de reatores nucleares que realiza com cálculo de depleção e é desenvolvido no Centro de Pesquisa Técnica da Finlândia (VTT Technical Research Centre of Finland). Atualmente, é utilizado por cerca de 180 grupos de usuários em 27 países. Este código se encontra na versão 1.1.18 sendo que a versão 2.0 está atualmente em fase de teste. O SERPENT também permite a utilização de processamento paralelo com o MPI (Message Passing Interface) para sua execução.

A paralelização, no modo de cálculo de queima, é dividida nas rotinas de pré-processamento e depleção em várias tarefas. Cada tarefa trata um material diferente e o aumento de desempenho pode-se tornar significativo.

O SERPENT é um dos únicos códigos MC que permitem a simulação com fonte externa com meio multiplicativo além de cálculos de depleção em uma única

simulação, a geometria não é tão problemática quanto a do MCNPX, pois já existem elementos pré-definidos que são encontrados em reatores nucleares, como por exemplo, elementos combustíveis em, em arranjo hexagonal.

A descrição da geometria no SERPENT é feita definindo-se uma vareta e os raios de cada material que a compõe. Diferentemente do MCNPX os materiais são referenciados por nomes, seguidos do raio ocupado, partindo do centro da vareta até a extremidade.

Por exemplo, para se definir uma vareta de combustível, os materiais que compõe esta vareta, devem ser descritas do centro para fora da vareta. Assim, se o combustível está designado com um raio de 0,4024 cm, a definição do gap deve iniciar de um raio maior que o do combustível. O gap é designado pela palavra reservada void.

A definição das varetas, seja de combustível ou as de controle, devem ser terminadas, sempre com o nome do material utilizado como refrigerante (Sódio, por exemplo). É importante lembrar que cada definição de vareta recebe um número, que é chamado de universo.

Após as definições das varetas, basta informar o tipo de arranjo utilizado e o pitch de varetas para completar a descrição do núcleo do reator. Se existem varetas com diferentes composições de combustível, deve-se informar o número de cada universo na posição desejada.

Ambos os códigos permitem a utilização da mesma biblioteca, realizam cálculo de depleção do combustível indicando a quantidade de cada elemento nos diferentes passos de queima, sendo possível fazer um inventário de queima em ambos os códigos para cada intervalo de queima. Este intervalo é informado pelo usuário.

Para a descrição do material, tanto o MCNPX como o SERPENT usam a mesma forma. Basta informar o “código” do elemento desejado e sua concentração que pode ser atômica (átomos/barn·cm) ou fração de massa.

O código dos materiais é formado pelos seus números atômicos e por seus números de massa. Por exemplo, o código para o elemento ^{238}U é 92238.

Para se identificar as diferentes versões das bibliotecas, existem números que vêm depois do código do elemento. Esses números são a versão das bibliotecas para o MCNPX e, para o SERPENT, as temperaturas (em Kelvin) das bibliotecas. Portanto, no MCNPX o código 92238.66c indica que a biblioteca utilizada é a ENDF6.6. Para o SERPENT o código completo é 92238.06c, onde o .06c indica a temperatura em que a biblioteca foi avaliada (600 K).

Ainda na descrição do material, o código SERPENT permite definir os materiais de outra forma. Assim pode-se usar o símbolo do elemento químico seguido de seu número de massa. Por exemplo, O-16.09c é o ^{16}O a uma temperatura de 900 K.

Se o material é composto por mais de um elemento químico basta inserir os demais elementos. As tabelas abaixo mostram o exemplo de um revestimento de zircaloy (Tabela 8.1) para o MCNPX e para o dióxido de urânio (Tabela 8.2) para o SERPENT. Note que para a entrada em fração de massa deve-se colocar o sinal de negativo.

Além das informações dos elementos e de suas concentrações, é necessário informar também, a densidade dos materiais. No MCNPX essa informação fica junto com a definição do local que o material está. No SERPENT a informação da densidade fica junto com a definição do material. Em ambos os códigos a densidade pode ser informada em g/cm^3 ou em densidade atômica (átomos/barn·cm).

Tabela 8.1. Exemplo de um revestimento de zircaloy no MCNPX.

Elemento	Fração de massa
40000.66c	-0,98135
24000.66c	-0,00100
26000.66c	-0,00135
28000.42c	-0,00055
50000.06c	-0,01450
8016.06c	-0,00125

Tabela 8.2. Exemplo de dióxido de urânio no SERPENT.

Elemento	Densidade Atômica
92234.09c	9,14E-02
92235.09c	9,35E+00
92238.09c	2,15E+02
O-16.09c	4,49E+02

Para a validação das simulações realizadas utilizando o código SERPENT foram realizadas algumas simulações de reatores para a comparação direta com o MCNPX, já que o MCNPX é amplamente utilizado para a simulação de reatores.

Os reatores simulados foram um PWR com combustível do tipo MOX (Figura 8.1), um reator do tipo VVER (Figura 8.2) e um terceiro do tipo CANDU (Figura 8.3). Os resultados obtidos com essas simulações se encontram na Tabela 8.3.

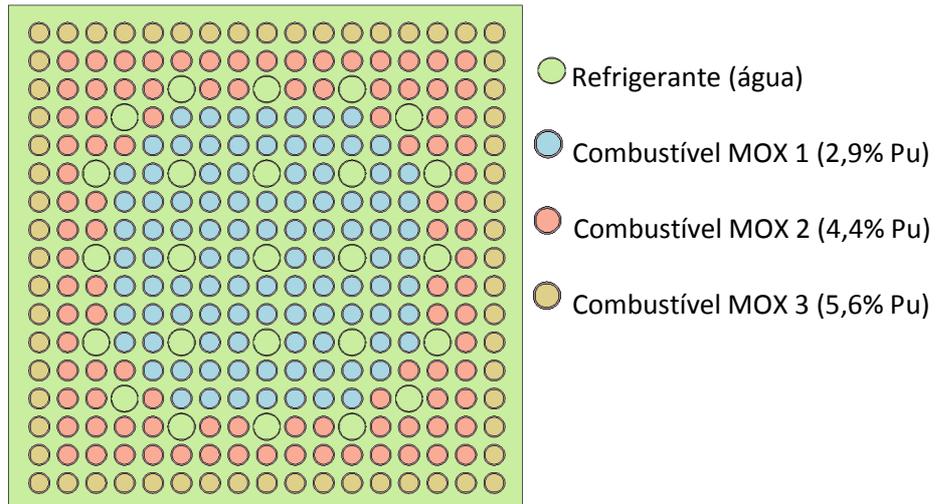


Figura 8.1 Geometria utilizada na simulação do PWR.

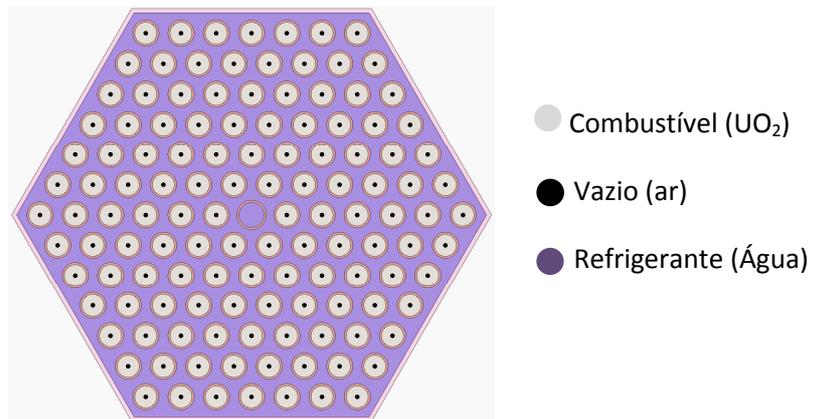


Figura 8.2 Geometria utilizada na simulação do reator VVER.

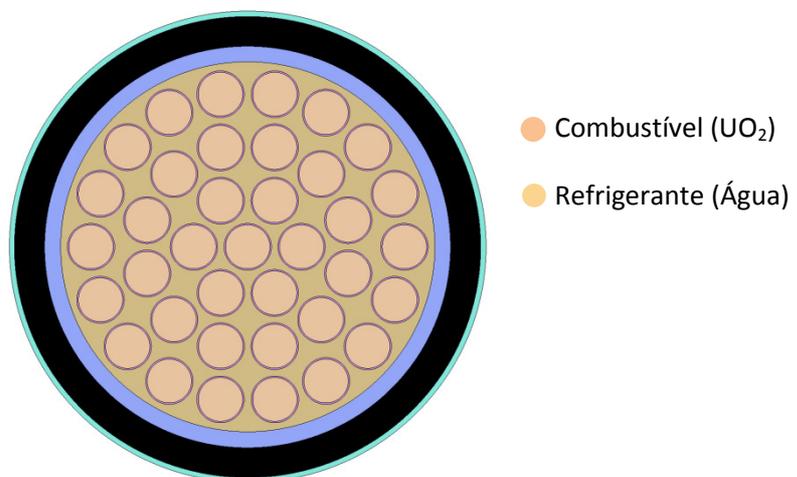


Figura 8.3. Geometria utilizada na simulação do reator tipo CANDU.

Tabela 8.3 Comparação entre o SERPENT e o MCNPX para os reatores PWR, CANDU e VVER.

Reator	k_{eff}		Diferença ² (pcm)
	MCNPX	SERPENT	
VVER	1,28763	1,28807	34,17
CANDU	0,94169	0,94207	40,34
PWR	1,00176	1,00184	7,99

Recentemente Allen *et al.*,(2011) publicou uma proposta de referência para reatores regeneradores baseado no reator de teste avançado para queima de AM (ABTR). Este reator tem uma potência térmica de 250 MW, sendo refrigerado com sódio. A Figura 8.4 mostra a geometria e disposição dos elementos do núcleo do reator utilizado na simulação com MCNPX.

As Tabelas 8.4, 8.5, e 8.6 trazem as composições dos diferentes combustíveis utilizados. Já as Tabelas 8.7, 8.8 e 8.9 mostram a composição das varetas, refletor e barras de controle, respectivamente.

A Tabela 8.10 traz informações gerais do reator, como pitch e diâmetro de varetas do reator, entre outras.

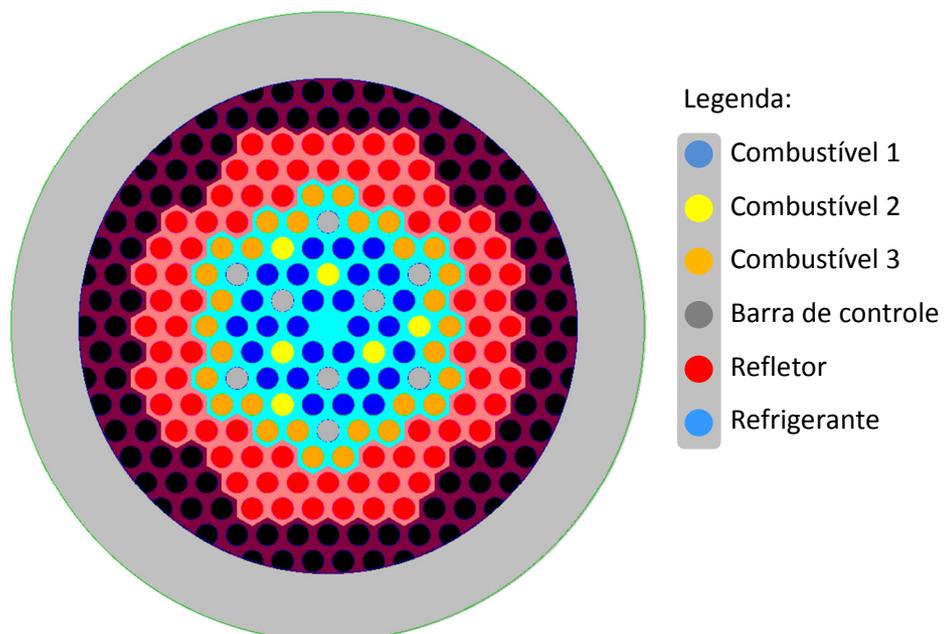


Figura 8.4. Núcleo de reator ABTR simulado no MCNPX.

² Em módulo: diferença = $|K_{\text{eff}} \text{ MCNPX} - k_{\text{eff}} \text{ SERPENT}|$

Tabela 8.4. Composição do Combustível 1 (densidade 10,818 g/cm³).

Elemento	Concentração (átomos/barns cm)
U-234	1,22E-04
U-235	3,22E-01
U-236	2,06E-02
U-238	2,02E+02
Np-237	3,84E-02
Pu-236	1,39E-07
Pu-238	9,59E-03
Pu-239	3,50E+01
Pu-240	3,74E+00
Pu-241	2,45E-01
Pu-242	1,75E-02
Am-241	1,42E-02
Am-242	2,85E-04
Am-243	6,13E-04
Cm-242	4,71E-04
Cm-243	7,41E-06
Cm-244	4,83E-05
Cm-245	1,91E-06
Cm-246	2,61E-08

Tabela 8.5. Composição do Combustível 2 (densidade 10,851 g/cm³).

Elemento	Concentração (átomos/barns cm)
U-234	1,00E-02
U-235	3,20E-01
U-236	1,95E-02
U-238	1,97E+02
Np-237	1,81E+00
Pu-236	9,08E-06
Pu-238	9,05E-01
Pu-239	2,35E+01
Pu-240	1,09E+01
Pu-241	2,94E+00
Pu-242	2,19E+00
Am-241	2,13E+00
Am-242	5,83E-02
Am-243	4,36E-01
Cm-242	7,35E-02
Cm-243	2,44E-03
Cm-244	1,10E-01
Cm-245	9,77E-03
Cm-246	6,77E-04

Tabela 8.6. Composição do Combustível 3 (densidade 10,818 g/cm³).

Elemento	Concentração (átomos/barns cm)
U-234	1,50E-02
U-235	3,18E-01
U-236	1,86E-02
U-238	1,93E+02
Np-237	3,13E-02
Pu-236	9,11E-08
Pu-238	9,87E-03
Pu-239	4,31E+01
Pu-240	4,56E+00
Pu-241	2,95E-01
Pu-242	2,06E-02
Am-241	2,23E-02
Am-242	4,08E-04
Am-243	7,56E-04
Cm-242	5,63E-04
Cm-243	9,05E-06
Cm-244	5,53E-05
Cm-245	2,00E-06
Cm-246	2,41E-08

Tabela 8.7. Composição do revestimento da vareta de combustível (densidade 7,5357 g/cm³).

Elemento	Concentração (átomos/barns cm)
Fe-54	4,08E+01
Fe-56	6,41E+02
Fe-57	1,48E+01
Fe-58	1,97E+00
Ni-58	2,93E+00
Ni-60	1,13E+00
Ni-61	4,91E-02
Ni-62	1,57E-01
Ni-64	3,99E-02
Cr-50	4,51E+00
Cr-52	8,70E+01
Cr-53	9,87E+00
Cr-54	2,46E+00
Mn-55	4,60E+00
Zr-nat	4,91E+00

Tabela 8.8. Composição do refletor (densidade 5,3908 g/cm³).

Elemento	Concentração (átomos/barns cm)
Na-23	7,15E+01
Fe-54	2,77E+01
Fe-56	4,35E+02
Fe-57	1,01E+01
Fe-58	1,34E+00
Ni-58	1,99E+00
Ni-60	7,67E-01
Ni-61	3,33E-02
Ni-62	1,06E-01
Ni-64	2,71E-02
Cr-50	3,06E+00
Cr-52	5,91E+01
Cr-53	6,70E+00
Cr-54	1,67E+00
Mn-55	3,12E+00
Zr-nat	3,33E+00

Tabela 8.9. Composição da barra de controle (densidade 1,5643 g/cm³).

Elemento	Concentração (átomos/barns cm)
C-12	4,07E+01
B-10	1,64E+02
B-11	6,62E+02

Tabela 8.10. Parâmetros gerais do reator ABTR.

Parâmetro	Valor (cm)
“Pitch” do elemento combustível	14,685
“Pitch” da varetas de combustível	0,9134
Diâmetro da vareta de combustível	0,8048
Espessura do revestimento	0,0523
Altura ativa do combustível	84,4108

A biblioteca de dados utilizada foi a ENDF B-VI.6a, que é fornecida juntamente com o MCNPX 2.6. Esta biblioteca foi avaliada em diferentes temperaturas. O refrigerante utilizado na simulação deste reator é o sódio com uma concentração de $2,2272 \times 10^{-2}$ átomos/barns·cm.

Como o MCNPX e o SERPENT não permitem a mudança na temperatura durante a simulação, caso queira-se avaliar o efeito da temperatura, deve-se ter as bibliotecas nas temperaturas requeridas, refazer a simulação e comparar os resultados.

A simulação deste sistema foi feita com um total de 130 ciclos mas somente os últimos 100 ciclos são contabilizados nos resultados. Cada ciclo foi simulado com 1×10^4 nêutrons, totalizando 10^6 nêutrons, isto sem levar em conta os nêutrons produzidos por fissão. A Tabela 8.11 mostra a divisão dos intervalos utilizados na queima do combustível na simulação do reator ABTR.

Tabela 8.11. Intervalos de queima do reator ABTR

Intervalo	Duração (dias)
1	27,39
2	27,39
3	54,78
4	109,56
5	109,56
6	109,56
7	109,56
8	109,56
9	109,56
10	109,56
11	109,56
12	109,56

O próximo passo foi realizar a simulação deste mesmo sistema no SERPENT 1.1.18 para a comparação com o resultado do MCNPX e verificar se os resultados de ambos os códigos MC são compatíveis para o caso de reatores subcríticos. A Figura 8.5 mostra o núcleo do reator simulado no SERPENT.

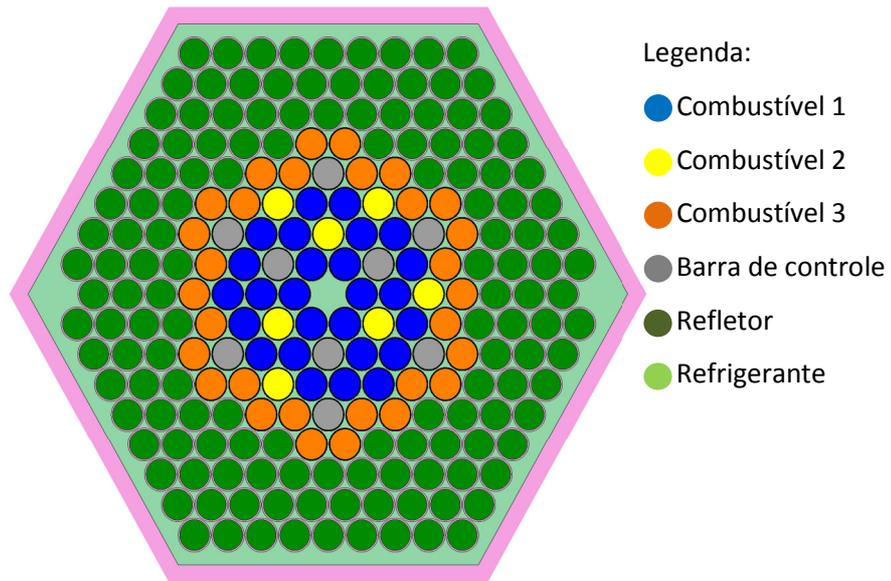


Figura 8.5. Núcleo do reator ABTR, simulado no SERPENT.

A simulação também foi realizada com 130 ciclos, utilizando o mesmo número de nêutrons que na simulação feita pelo o MCNPX.

Com estas condições Allen *et al.* (2011) obtiveram um k_{eff} de 1,04961. Ao reproduzir esta simulação foi obtido um k_{eff} inicial de 1,04622, ou seja, uma diferença de 83 pcm.

Vale ressaltar que o tempo de simulação do SERPENT, para este mesmo sistema, foi de aproximadamente 20 h. Isso se deve ao fato que o SERPENT é específico para simulação de reatores, enquanto o MCNPX é um código mais geral. Assim o SERPENT pode utilizar mecanismos de otimização, como por exemplo, uma mudança no algoritmo de cálculo do livre caminho médio, sem perda de informação.

Os resultados da comparação são apresentados na Tabela 8.12. Já os gráficos das Figuras 8.7 e 8.8, mostram a comparação do k_{eff} e da queima nos dois sistemas, respectivamente. Pode-se observar, através da Figura 8.6 que o reator simulado se torna subcrítico somente após 550 dias de operação.

Tabela 8.12. Resultados da simulação do reator ABTR, utilizando os códigos MCNPX e no SERPENT.

Tempo (dias)	Reatividade (pcm)		Burnup (Gwd/MTU)		Diferença ³ reatividade (pcm)	Diferença ¹ Burnup (Gwd/MTU)
	MCNPX	SERPENT	MCNPX	SERPENT	MCNPX	SERPENT
0,0	4335	4418	0,000	0,000	83	0,000
27,39	4033	4114	1,325	1,324	81	0,001
54,78	3906	3788	2,649	2,649	118	0,000
109,6	3544	3462	5,298	5,297	81	0,001
219,1	2759	2343	10,600	10,594	415	0,006
328,7	1749	1642	15,890	15,891	106	0,001
438,2	1053	1255	21,190	21,188	202	0,002
547,8	15	106	26,490	26,485	91	0,005
657,4	-838	-1058	31,790	31,782	220	0,008
766,9	-1848	-1822	37,090	37,079	26	0,011
876,5	-2703	-2356	42,390	42,376	347	0,014
986,0	-3543	-3279	47,680	47,673	264	0,007
1096,0	-4499	-4906	52,980	52,970	407	0,010

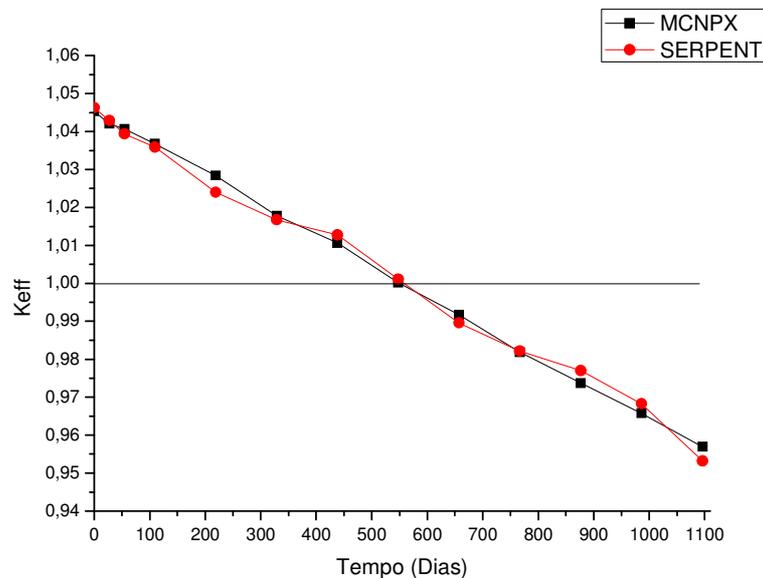


Figura 8.6. Comparação do valor do k_{eff} entre o MCNPX e o SERPENT.

¹ diferença burnup = |burnup MCNPX – burnup SERPENT|

³ diferença reatividade = | k_{eff} MCNPX – k_{eff} SERPENT|

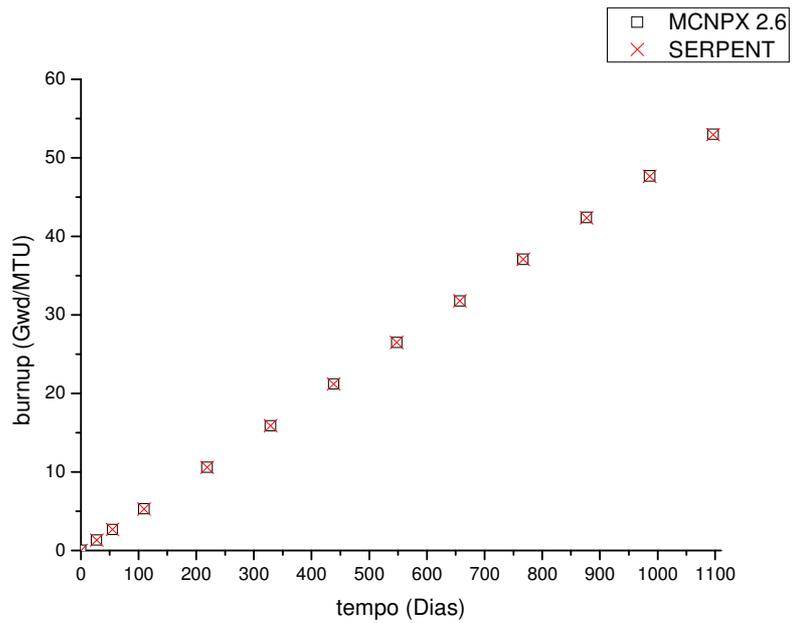


Figura 8.7. Comparação do valor do burnup entre o MCNPX e o SERPENT.

Uma opção interessante na simulação realizada com o SERPENT é a possibilidade de uma visualização das áreas mais 'quentes' do reator, que são representadas por tons de vermelho e amarelo, representando a potência relativa da fissão nuclear, e em tons de azul são as áreas 'frias', representando fluxo térmico relativo (ver Figuras 8.9 e 8.10).

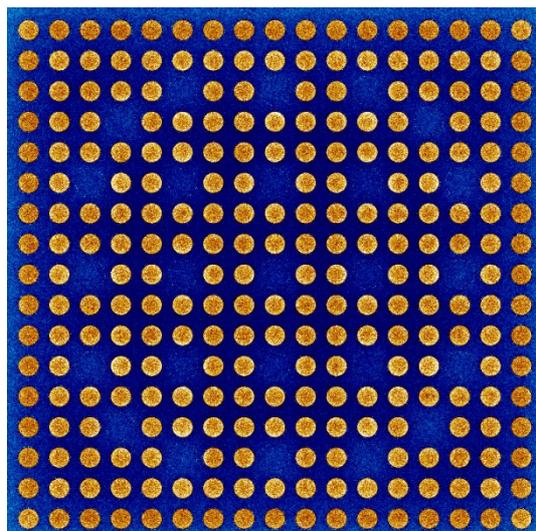


Figura 8.8 Representação das áreas 'quentes' e 'frias' de um elemento combustível do reator PWR simulado.

Para a observação nas alterações nos esquemas de cores a normalização é fixa após o primeiro passo de queima. A Figura 8.9 abaixo mostra a representação das áreas quentes e frias para o reator ABTR, simulado por Allen *et al.* (2010), em quatro estágios diferentes de queima.

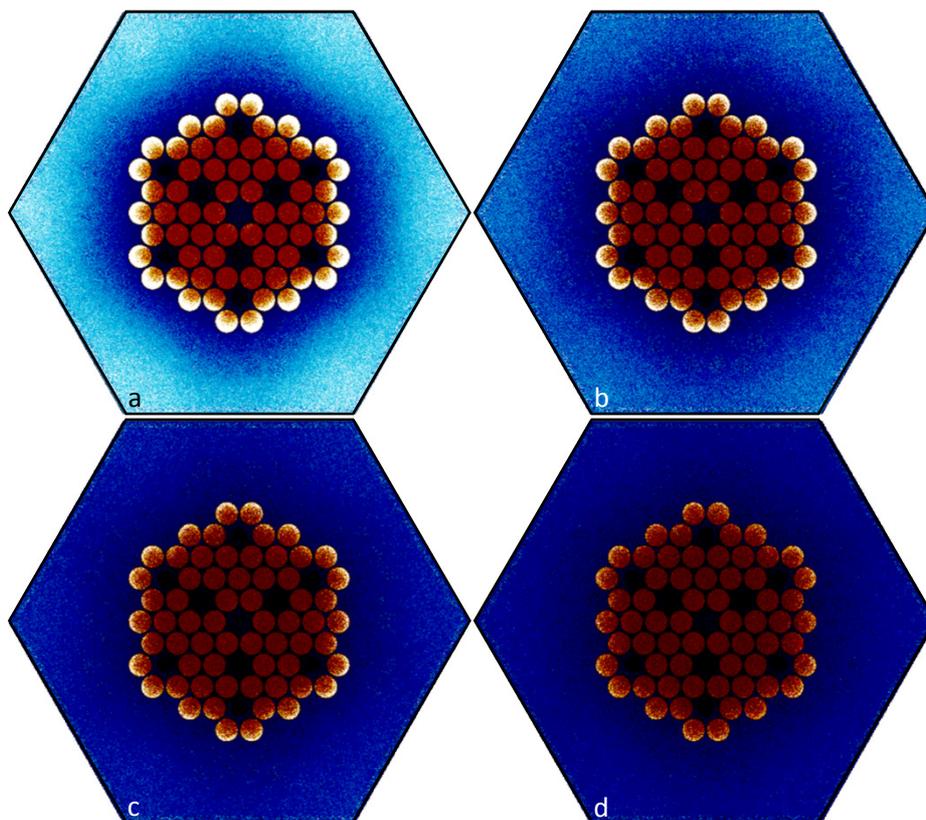


Figura 8.9: Gráfico mostrando as áreas quentes e frias para o reator ABTR. a) início do ciclo, b) 320 dias, c) 760 dias e d) 1100 dias.

A partir das Tabelas 8.12, 8.3 e do gráfico da Figura 8.6, pode-se verificar que os dois códigos MC apresentam resultados satisfatórios para os valores do k_{eff} , com diferença máxima de 415 pcm para o reator ABTR. Esta diferença pode ser devido à geração de números aleatórios presente no método MC. Uma maneira de ser diminuir esta diferença é aumentando a quantidade de partículas simuladas, porém o tempo de simulação tornar-se demasiadamente grande (Antolin, 2009). Outra possibilidade é a falta de dados mais precisos dos materiais utilizados como combustíveis no reator ABTR.

Como o código SERPENT é mais novo, a comparação da simulação do mesmo sistema simulado no MCNPX se justifica para saber se o código SERPENT reproduz sistemas subcríticos adequadamente. Além disso, o SERPENT permite a simulação de reatores nucleares com fonte externa, mesmo que estas simulações se limitem a

problemas de fonte externa fixa. Devemos lembrar que o SERPENT só realiza simulação de reatores nucleares, enquanto o MCNPX é um código que pode ser aplicados a outros problemas além de simulações de reatores.

9. Resultados

As equações da cinética pontual, obtidas no capítulo 3, para sistemas subcríticos foram comparadas com a simulação MC devido à dificuldade de se obter dados experimentais de reatores subcríticos. As simulações foram feitas utilizando potência constante, linear, exponencial e também uma variação aleatória.

A utilização do método das derivadas da potência nuclear é interessante por permitir a implementação de sistemas de monitoramento em tempo real da reatividade associada a uma variação da potência nuclear, tornando-se muito atraente para aplicações em reatores do tipo ADS.

A Figura 9.1 mostra a geometria utilizada nas simulações de todos os casos simulados. As composições dos materiais são as mesmas mostradas nas Tabelas 8.7, 8.8 e 8.9, para vareta, refletor, barra de controle e da vareta de combustível. Para a composição do combustível foi usada a composição mostrada na Tabela 9.1.

Tabela 9.1 Composição do combustível usado.

Elemento	Concentração (fração de massa)
U-235	-0.14673
U-238	-0.73477
O-16	-0.11850

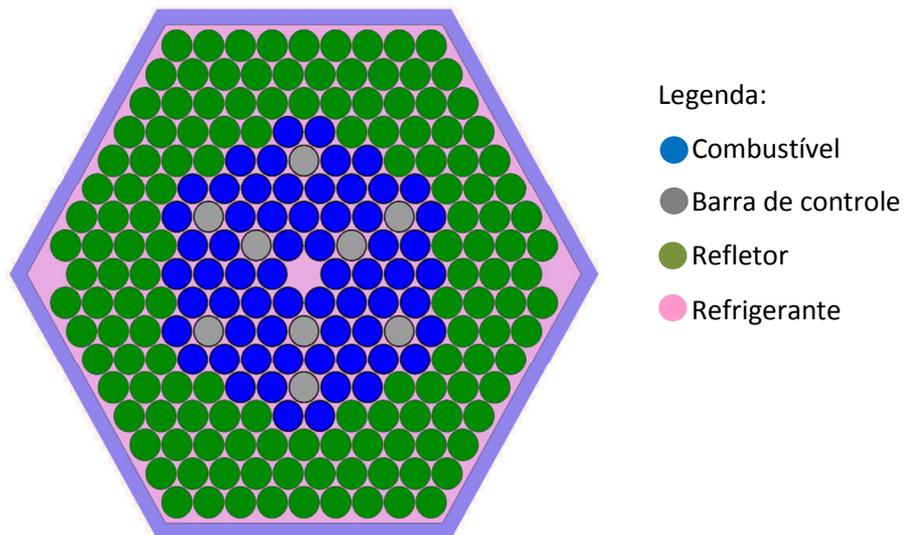


Figura 9.1: Geometria utilizada na simulação de um reator subcrítico.

Os valores utilizados para a comparação da simulação Monte Carlo com os resultados das equações, para cada um dos casos do capítulo 3, encontram-se na Tabela 9.2. Esses valores foram obtidos diretamente do arquivo de saída da simulação realizada no SERPENT, com a exceção do valor de Γ , que foi extraído de Silva (2011).

Tabela 9.2: Valores utilizados nas equações da cinética pontual para sistemas subcríticos.

Parâmetro	Valor
β	0.00706
Λ	1.21×10^{-5} s
λ	2.1979×10^{-1} s
Γ	-0.77×10^{-10}

9.1. Variação Linear da Potência Nuclear

Para um reator subcrítico chegar a sua potência de operação, deve-se monitorar a reatividade para se evitar algum tipo de acidente. Assim, podemos supor uma inserção de reatividade de maneira linear (equação 4.43). Esta simulação foi feita considerando uma taxa de aumento de 5% por hora do valor inicial da potência sendo monitorado por um período de 6 horas.

A Tabela 9.3 mostra a comparação dos resultados obtidos entre o SERPENT e a equação da cinética inversa.

9.2. Potência Nuclear Constante

Para a simulação realizada a potência constante o tempo total de simulação foi de cerca de 12 horas. Esta diferença se dá unicamente devido ao diferente número de passos simulados, enquanto foram simulados 6 passos de uma hora para a variação

linear da potência, foram simulados 10 passos para a potencia constante. Esta simulação tenta reproduzir a operação em condições normais do reator. A Tabela 9.4 mostra a comparação dos resultados obtidos para a potência de 80 MW.

9.3. Variação Exponencial da Potência

A variação exponencial da potência foi simulada por um período de 1 hora em intervalos de 10 minutos. A Tabela 9.5 mostra a comparação dos resultados obtidos com uma taxa de aumento de 0.0001.

Tabela 9.3: Comparação dos dados obtidos para uma potência linear.

Potencia (MW)	Tempo (h)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
		SERPENT	TAF	HGPT	TAF - SERPENT	HGPT - SERPENT
80	1	-2069	-2125	-2119	56	50
84	2	-2050	-2125	-2125	75	75
88	3	-2122	-2134	-2134	12	12
92	4	-2077	-2143	-2143	66	66
96	5	-2142	-2151	-2151	9	9
100	6	-2119	-2158	-2158	39	39

Tabela 9.4: Comparação dos dados obtidos para uma potência constante.

Tempo (min)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
	SERPENT	TAF	HGPT	TAF - SERPENT	Gandini - SERPENT
0	-2133	-2146	-2146	12	12
10	-2152	-2146	-2146	6	6
20	-2144	-2146	-2146	2	2
30	-2167	-2146	-2146	21	21
40	-2151	-2146	-2146	5	5
50	-2127	-2146	-2146	18	18
60	-2177	-2146	-2146	31	31
70	-2145	-2146	-2146	0	0
80	-2152	-2146	-2146	6	6
90	-2160	-2146	-2146	14	14

Tabela 9.5 Comparação dos dados obtidos para uma variação exponencial da potência.

Potencia (MW)	Tempo (min)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
		SERPENT	TAF	HGPT	TAF - SERPENT	HGPT - SERPENT
80	0	2065	2120	2120	55	55
115	10	2108	2107	2107	0	0
165	20	2104	2115	2114	11	10
235	30	2070	2114	2115	44	45
337	40	2083	2115	2115	32	32
483	50	2126	2115	2117	11	9

9.4. Variação Genérica da Potência

A avaliação da operação do reator com grandes variações de potência durante sua operação foi feita durante um período de 6 horas. Neste intervalo foi simulada uma súbita queda de potência e posteriormente uma subida repentina da potência. A Tabela 9.6 mostra os resultados obtidos.

Tabela 9.6. Comparação dos resultados entre a simulação MC e os formalismos apresentados.

Potencia (MW)	Tempo (h)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
		SERPENT	TAF	HGPT	TAF - SERPENT	HGPT - SERPENT
80	0	2075	2029	2029	46	46
90	1	2075	2188	2188	113	113
0	2	2143	2118	2118	24	24
40	3	2050	2120	2120	70	70
80	4	2133	2231	2231	97	97
100	5	2080	2163	2163	83	83

9.5. Variação temporal de β e Λ

Nesta seção serão apresentados os resultados obtidos levando-se em conta a variação temporal da fração de nêutrons retardados e do tempo médio de geração dos nêutrons.

9.5.1. Variação linear da potência

Assim como na seção 9.1, a Tabela 9.7 mostra os resultados obtidos para uma variação linear de potência, porém os resultados abaixo foram levados em conta às variações temporais de β e de Λ . Como o SERPENT já fornece os valores de β e Λ para cada passo de queima, esses valores foram utilizados para a obtenção da reta de ajuste que foi utilizada em todos os casos com variação temporal de β e de Λ . Assim não foi necessário realizar novas simulações.

Tabela 9.7. Variação linear com variação temporal de β e Λ .

Potencia (MW)	Tempo (h)	Λ ($\times 10^{-5}$) (s)	β (pcm)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
				SERPENT	TAF	HGPT	TAF – SERPENT	HGPT – SERPENT
80	1	1,1661	707,65	-1911	-1904	-1904	6	6
84	2	1,1654	707,66	-2015	-2014	-2014	0	0
88	3	1,1647	707,52	-2040	-2068	-2068	28	28
92	4	1,1639	707,75	-2041	-2121	-2121	80	80
96	5	1,1632	707,80	-2038	-2165	-2165	127	127
100	6	1,1625	707,51	-2033	-2174	-2174	141	141

9.5.2. Potência constante

Já para o reator operando a uma potência constante, a Tabela 9.8 mostra os resultados obtidos para variações lineares de β e Λ . Lembrando que esta a duração desta simulação foi de aproximadamente 12 horas.

Tabela 9.8. Variação temporal de Λ para potência constante

Tempo (min)	Λ ($\times 10^{-5}$) (s)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
		SERPENT	TAF	HGPT	TAF - SERPENT	HGPT - SERPENT
0	1,1689	-2134	-2141	-2141	7	7
10	1,1682	-2152	-2146	-2146	6	6
20	1,1675	-2144	-2139	-2139	5	5
30	1,1668	-2167	-2150	-2150	17	17
40	1,1661	-2151	-2147	-2147	4	4
50	1,1654	-2127	-2145	-2145	18	18
60	1,1647	-2177	-2146	-2146	31	31
70	1,1639	-2145	-2145	-2145	0	0
80	1,1632	-2152	-2151	-2151	1	1
90	1,1625	-2160	-2146	-2146	14	14

9.5.3. Variação Exponencial da Potência

Utilizando a mesma variação de potência da seção 9.3, a operação do reator foi simulada por um período de 6 horas. Para este caso, a taxa de aumento de potência também foi de 0.0001. A Tabela 9.9 mostra os resultados obtidos.

Tabela 9.9. Comparação dos resultados para uma variação exponencial de potência, com β e Λ variáveis no tempo.

Potência (MW)	Λ ($\times 10^{-5}$) (s)	β (pcm)	Tempo (h)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
				SERPENT	TAF	HGPT	TAF - SERPENT	HGPT - SERPENT
80	1,1408	707,65	0	-2065	-2190	-2190	125	125
115	1,1405	707,66	1	-2107	-2143	-2143	36	36
165	1,1399	707,52	2	-2104	-2091	-2091	13	13
235	1,1395	707,75	3	-2070	-2060	-2060	9	9
337	1,1388	707,80	4	-2083	-2003	-2003	81	80
483	1,1384	707,51	5	-2126	-1914	-1914	212	212

9.5.4. Variação Genérica da Potência

Mais uma vez, realizando a mesma variação de potência da seção 9.4, a avaliação da operação do reator com grandes variações de potência também foi realizada juntamente com a variação de β e Λ . A Tabela 9.10 mostra os resultados obtidos.

Tabela 9.10. Comparação dos resultados para uma variação genérica de potência, com β e Λ variáveis no tempo.

Potência (MW)	Λ ($\times 10^{-5}$) (s)	β (pcm)	Tempo (h)	Reatividade (pcm)			Diferença (pcm)	
				Serpent	TAF	HGPT	TAF - SERPENT	HGPT - SERPENT
80	1,1408	707,65	0	-1473	-1575	-1575	102	102
90	1,1405	707,66	1	-1467	-1469	-1469	2	2
0	1,1399	707,52	2	-1446	-1525	-1525	79	79
40	1,1395	707,75	3	-1478	-1529	-1529	51	51
80	1,1388	707,80	4	-1509	-1369	-1369	140	140
100	1,1384	707,51	5	-1602	-1579	-1579	23	23

9.6. Parâmetros Nucleares

Os parâmetros integrais são muitas vezes utilizados para dar informações imediatas e completas sobre as características físicas dos reatores nucleares. Eles podem aparecer diretamente da modelagem matemática do sistema ou podem ser introduzidos, tanto artificialmente, com a finalidade de quantificar as características físicas para que se permitam comparações entre diferentes configurações ou na interpretação das medições experimentais. Assim, enquanto algumas quantidades integrais em física de reatores detêm um significado matemático (por exemplo, o fator de multiplicação como sendo o autovalor do problema de equilíbrio), outras quantidades podem carregar significados diferentes de acordo com os objetivos específicos para os quais são introduzidos. Este fato pode causar uma grande confusão, especialmente quando o mesmo termo é utilizado para denotar grandezas físicas bastante diferentes. Este é o caso, por exemplo, de parâmetros integrais introduzidos em modelos cinéticos que são obtidos através da ponderação das equações da cinética. Enquanto que o procedimento é bem estabelecido na cinética dos sistemas críticos, o caso de sistemas com fonte externa pode estar aberto a ambiguidade, já que não existe uma única função de ponderação e sua escolha pode ser relacionada mais para conveniência numérica, ou para a necessidade de obter alguns resultados muito específicos (Dulla, 2011).

Por outro lado, muitas vezes esses mesmos termos podem ser obtidos, por exemplo, por técnicas de simulação MC. Este é o caso de reatividade, fração de nêutrons retardados e o tempo de geração de nêutrons. É especialmente importante observar que os sistemas subcríticos exigem um repensar de toda abordagem teórica concebida para sistemas críticos.

Análises realísticas da cinética de sistemas subcríticos são atualmente feitas através da solução direta das equações, seja por difusão ou por modelos de transporte. Informações altamente detalhadas e precisas sobre a evolução dos nêutrons são necessárias, entretanto os modelos pontuais são muito simplificados e podem não fornecer informações suficientes. Além disso, ferramentas numéricas e computacionais eficientes estão disponíveis, tornando possível evitar as restrições dos modelos da cinética pontual. No entanto, os parâmetros integrais são úteis em qualquer caso para a obtenção de informações completas sobre o comportamento físico do sistema para ter uma indicação imediata sobre as características cinéticas do sistema.

O conceito de parâmetros integrais parece perder significado e relevância para sistemas subcríticos guiados por fonte. Por isso, para as quantidades integrais medidas ou simuladas, as definições dos parâmetros gerados devem sempre estar especificados para evitar interpretações equivocadas e incorretas de tais resultados.

Para comparar alguns parâmetros, as simulações foram feitas utilizando tanto combustível fresco quanto combustível usado. Assim pode-se comparar alguns parâmetros nucleares do início do ciclo de combustível com os resultados de combustível no final do ciclo. Alguns parâmetros, como a fração de nêutrons retardados (β) e o tempo de geração média de nêutrons (Λ) são fornecidos pelo código SERPENT ao final de cada simulação.

Tabela 9.11 Comparação de parâmetros nucleares.

Parâmetro	Combustível fresco	Combustível queimado	Referência (Dulla, <i>et al.</i> 2011)
β	0,00706	0,00340	0,00644
Λ	$1,21 \times 10^{-5}$ s	$1,06 \times 10^{-5}$ s	$1,58 \times 10^{-5}$ s

A partir da Tabela 9.11 pode-se verificar que a fração de nêutrons retardados tem uma diminuição de quase a metade em comparação ao seu valor inicial. Isso é de se esperar devido à queima do combustível, fazendo com que este parâmetro não seja tão importante na operação de um reator nuclear no final do ciclo do combustível como é em seu início.

O valor para a fração de nêutrons retardados para combustível fresco, no reator subcrítico Yalina operando a um k_{eff} de 0,98 é de 644 pcm (Dulla, *et al.* 2011), ou seja, uma diferença de 62 pcm em relação ao valor encontrado na Tabela 9.11. Vale ressaltar que, segundo Dulla *et al.* (2011), os parâmetros integrais dependem do nível de subcriticalidade.

Outro parâmetro importante para a solução das equações de cinética pontual e para o controle do reator, sendo muitas vezes utilizado para determinar a resposta dinâmica de um reator nuclear, é o tempo de vida de nêutrons prontos (Λ) (Abánades *et al.*, 2001). Para reatores térmicos este valor é em torno de 10^{-4} s enquanto para reatores subcríticos este valor é da ordem de 10^{-5} s. Segundo Dulla *et al.* (2011), o valor para este parâmetro é de 14,8 μ s para combustível fresco. Assim o valor encontrado (12,1 μ s) é próximo ao encontrado na literatura com um desvio percentual

de 18%. Este desvio pode se devido às diferentes composições do combustível e também pela diferença de enriquecimento.

10. Conclusão

A medição da reatividade utilizando-se a cinética inversa é amplamente utilizada na partida de um reator nuclear. Assim uma medição acurada da reatividade é imprescindível para o controle do reator (Díaz et al. 2007).

Os formalismos propostos por Gandini (2000) e por Silva *et al.* (2011) envolvem a fonte externa para descrição do comportamento cinético dos reatores subcríticos guiados por fontes. Porém, como ainda não existem reatores ADS em operação, as simulações de tais sistemas são importantes para a avaliação preliminar do funcionamento desses reatores.

Os resultados apresentados no capítulo anterior mostram que as equações da cinética inversa para sistemas subcríticos, propostas nesta tese, reproduzem satisfatoriamente os reatores subcríticos guiados por fonte, sejam utilizando o método das derivadas quanto resolvendo a integral do histórico de potência, tanto para o formalismo proposto por Gandini (2000) quanto o proposto por Silva *et al.* (2011). Ainda pode-se notar que tanto para valores constantes como para variações lineares de β e Λ os resultados são coerentes. Isto ocorre devido à pequena variação de β ($-2,17857 \times 10^{-7}$) e Λ ($7,14286 \times 10^{-10}$).

Vale ressaltar que o método das derivadas se torna interessante para o monitoramento da reatividade por não necessitar do armazenamento de todo o histórico potência e depender apenas das derivadas da potência, possibilitando que o cálculo da reatividade seja feito com uma maior rapidez se comparado com o tempo necessário para resolver a integral do histórico de potência. Além disso, este método não necessita do armazenamento de todo histórico de potência do reator e o cálculo pode ser reiniciado em caso de mau funcionamento do equipamento de medição da reatividade.

A simulação Monte Carlo foi utilizada para a validação dos métodos propostos devido à falta de dados nucleares para reatores subcríticos, porém mesmo com a boa reprodução deste tipo de simulação, a modelagem utilizada por estes métodos encontra problemas, pois os dados nucleares disponíveis, para alguns actinídeos, não atendem as faixas de energia necessárias para a simulação de um reator ADS. Esses dados devem cobrir além de uma vasta gama de energia e um grande conjunto de núclídeos (Vaz 2010), pois o grande atrativo dos reatores ADS é a transmutação de rejeitos de longa meia vida e também a produção de energia elétrica. Assim a ênfase

dos dados nucleares deve ser nos actínideos (por exemplo, Np, Am e o Cm.), para o acompanhamento do ciclo de combustível com a finalidade de reciclagem múltipla.

Mesmo assim, a simulação realizada para a validação das equações propostas por Gandini (2000) e por Silva *et al* (2011) mostra-se coerente para análise completa da reatividade de um reator subcrítico guiado por fonte.

Ainda assim, a simulação Monte Carlo pode ser utilizada para a análise preliminar de alguns parâmetros dos reatores nucleares (críticos ou subcríticos) como, por exemplo, o fator de multiplicação efetivo, a fração de nêutrons retardados e uma boa aproximação da quantidade de material transmutado, ajudando a prever o comportamento médio do reator.

Pode-se verificar que existe uma boa concordância entre os valores encontrados para os parâmetros nucleares e os existentes na literatura. Uma possível melhora nesses resultados passa por um aumento significativo na quantidade de histórias simuladas.

Este aumento contribuiria para a diminuição dos erros estatísticos intrínsecos do método Monte Carlo. Porém, o tempo de simulação também aumentaria sensivelmente, pois o método MC necessita da simulação individual de cada partícula podendo levar um tempo absurdamente grande, para a simulação de todo o sistema.

Porém, mesmo com a “falta” de dados nucleares mais precisos para os actínideos, a simulação MC se mostra uma importante ferramenta na área de física de reatores, devido a sua facilidade de trabalhar com geometrias bastante complexas permitindo também a simulação desses sistemas em três dimensões.

Uma solução interessante para a simulação de reatores nucleares seriam os métodos computacionais híbridos, ou seja, um método resultante da fusão da simulação Monte Carlo com técnicas determinísticas. Assim, poder-se-ia melhorar os pontos fortes e eliminar as fraquezas individuais do método MC e das abordagens deterministas. Apesar de algumas exceções, o desenvolvimento de ferramentas computacionais híbridas é, no entanto, ainda largamente inexplorado (Vaz, 2010).

11. Referências Bibliográficas

- Abánades A., Aleixandre J., Andriamonje S., Angelopoulos A., Apostolakis A., Arnould H., Belle E., Bompas C. A., Brozzi D., Bueno J., Buono S., Carminati F., Casagrande F., Cennini P., Collar J.I., Cerro E., Del Moral R., Díez S., Dumps L., Eleftheriadis C., Embid M., Fernández R., Gálvez J., García J., Gelès C., Giorni A., González E., González O., Goulas I., Heuer D., Hussonnois M., Kadi Y., Karaiskos P., Kitis G., Klapisch R., Kokkas P., Lacoste V., Le Naour C., López C., Loiseaux J. M., Martínez-Val J.M., Méplan O., Nifenecker H., Oropesa J., Papadopoulos I., Pavlopoulos P., Pérez-Enciso E., Pérez-Navarro A., Perlado M., Placci A., Poza M., Revol J.-P., Rubbia C., Rubio J.A., Sakelliou L., Saldaña F., Savvidis E., Schussler F., Sirvent C., Tamarit J., Trubert D., Tzima A., Viano J. B., Vieira S., Vlachoudis V., Zioutas K., 2001, “Experimental verification of neutron phenomenology in lead and of transmutation by adiabatic resonance crossing in accelerator driven systems. A summary of the TARC Project at CERN”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 463, pp. 586–592
- Abderrahim H. A., Sobolev V., Malambu E., 2005, “Fuel design for the experimental ADS MYRRHA”, in *Technical Meeting on use of LEU in ADS*. IAEA, Viena, Austria.
- Allen K., Knight T., Bays S., 2011, “Benchmark of Advanced Burner Test Reactor model using MCNPX 2.6.0 and ERANOS 2.1”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 53, pp. 633e – 644
- Antolin M. Q., 2009, *Simulação de tomografia Computadorizada de Raios X utilizando programação Paralela de Alto desempenho*. Dissertação de M.Sc., Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- Bomboni E., Cerullo N., Fridman E., Lomonaco G., Shwageraus E., 2010, “Comparison among MCNP-based depletion codes applied to burnup calculations of pebble-bed HTR lattices”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 240, pp. 918–924.
- Catsaros N., Gaveau B., Jaekel M., Maillard J., Maurel G., Savva P., Silva J., Varvayanni M., Zisis Th., 2009, “Criticality qualification of a new Monte Carlo code for reactor core analysis”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 36, pp. 1689–1693
- Díaz D. S. Martinez A. S. Silva, F. C., 2007, “Formulation for the Calculation of Reactivity Without Nuclear Power History”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 44, n. 9, pp. 1149–1155.

- Díaz D. S. Martinez A. S. Silva, F. C., 2007, *Métodos para Cálculo da Reatividade Usando Derivadas da Potência Nuclear e o Filtro FIR*, tese de D.Sc. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- Dulla S., Picca P., Ravetto P., Tomatis D., Carta M., 2011, “Integral parameters in source-driven systems”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 53, pp. 32 -40.
- Fokau A., Zhang Y., Ishida S., Wallenius J., 2010, “A source efficient ADS for minor actinides burning”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 37, pp. 540–545.
- Gandini, 2000, “Evolutionary Mobile Fuel Reactors”, In: *International Seminar on Advanced Nuclear Energy Systems Toward Zero Release of Radioactive Wastes*, Susono, Japan.
- Gandini, 2002, “On the multiplication factor and reactivity definitions for subcritical reactor systems”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 29, pp. 645–657.
- Grisell A., 2004, *Validation of Monte-Carlo Continuous Energy Burnup Code (MCB) on Light Water Reactor Fuel*, M.Sc Thesis, Department of Nuclear and Reactor Physics, Kungliga Tekniska Högskolan, Estocolmo, Suécia.
- Hashemi-Nezhad, S.R., Brandt R., Westmeier W., Bamblevski V.P., Krivopustov M.I., Kulakov B.A., Sosnin A.N., Wan J.-S., Odoj R., 2002, “Monte Carlo calculations on transmutation of trans-uranic nuclear waste isotopes using spallation neutrons: difference of lead and graphite moderators”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 482, pp. 547–557
- Hoogenboom, J. E., Van der Sluijs A. R., 1998, “Neutron Source Strength Determination for on-line Reactivity Measurements.”, *Annals of Nuclear Energy*, v 15, n. 12, pp. 553 – 559.
- Iwanaga, Sekimoto, 2005. “Study on kinetics of subcritical system Contribution of delayed neutrons to the transient after a reactivity insertion”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 32, pp. 1953–1962.
- Kadi Y., Carminati F., 2001, “Simulation of Accelerator-Driven Systems”, in *Workshop on Hybrid Nuclear Systems for Energy Production, Utilisation of Actinides & Transmutation of Long-Lived Radioactive Waste Trieste*.
- Kitano A., Itagaki M., Narita M., 2000, “Memorial-Index-Based Inverse Kinetics Method for Continuous Measurement of Reactivity and Source Strength”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v.37, n. 1, pp.: 53 – 59.
- Leppänen J., 2007, *Development of a New Monte Carlo Reactor Physics Code*, tese de D.Sc., VTT Technical Research Centre of Finland.
- Leppänen J., 2012, “Serpent – A Continuous-energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code”, VTT Technical Research Centre of Finland.

- Liu Y., She D., Wang K., Yu G., 2011, "Optimization treatment of point-wise nuclear data in Monte Carlo criticality and burnup calculations", *Annals of Nuclear Energy*, v. 38, pp.: 1489–1495.
- Lodhi M. A. K., Shubov M., 2009, "Accelerator breeder reactors", *Annals of Nuclear Energy*, v. 36, pp. 837–843.
- Lurie D., Abramson L., Vail J., "Applying Statistics", in: *Office of Nuclear Reactor Regulation*, chapter 2, Washington, USA, 2011
- Maniscalco J. A., Wood, L. L., "Advanced Concepts in Fusion-fission hybrid reactors", In: *American Nuclear Society Winter Meeting*, Washington, D.C., Oct., 1974
- Mosteller R. D, MacFarlane R. E., Little R. C., White M. C., 2003, "Analysis of Hot and Cold Kritz Criticals with MCNP5 and Temperature-Specific Nuclear-Data Libraries", in *Advances in Nuclear Fuel Management III*, Carolina do Sul, USA.
- Nishihara K., Iwasaki T., Udagawa Y., 2003, "A New Static and Dynamic One-Point Equation and Analytic and Numerical Calculations for a Subcritical System", *Journal of nuclear science and technology*, 40, v. 7, pp.: 481–492.
- Pelowitz, 2008, "MCNPX USER'S MANUAL", Version 2.6.0, Los Alamos National Laboratory.
- Pereira, 2002, *um conceito alternativo de um reator híbrido (conjunto sub-crítico acoplado com acelerador)*, D. Sc. IPEN/USP, São Paulo, Sp, Brasil.
- Perelygin V. P., Kulakov B.A., Krivopustov M.I., Petrova R. I., Abdullaev I. G., Bradnova V., Knjazeva G. P., Brandt R., Ochs M., Wan J.-S., Vater P., 1999, "SSNTD Studies of Lead nuclei Fission Induced by Relativistic p, d, He, and ^{12}C Projectiles Inside Massive Pb and U Targets", *Radiation Measurements*, v. 31, pp. 567-572.
- Piera et al., 2010, "Hybrid reactors: Nuclear breeding or energy production?", *Energy Conversion and Management*, v. 51, n. 9, 1758–1763.
- Rubbia C., Rubio J.A., 1996, "A Tentative Programme Towards a Full Scale Energy Amplifier." In *European Organization For Nuclear Research, CERN/LHC*.
- Rubbia C., Rubio J.A., Buono S., Carminati F., Fiétier N., Galvez J., Gelès C., Kadi Y., Klapisch R., Mandrillon P., Revol J.P., Roche Ch., 1995, "Conceptual Design of a fast Neutron Operated High Power Energy Amplifier", In *European Organization For Nuclear Research, CERN/LHC*.
- Salvat F., Fernández-Varea J. M., Sempau J., 2003, "PENELOPE – A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport", in *Workshop Proceedings Issy-les-Moulineaux, France*.

- Scal, D., 2012, *Método Alternativo Para o Cálculo da Reatividade Sem o Uso da Condição de Criticalidade do Reator Antes da Partida*, M.Sc. dissertação, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil.
- Silva C., Martinez A. S., Silva F. C., 2011, “A new formulation for the importance function in the kinetics of subcritical reactors”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 45, pp. 68–72.
- Sobolev V., Lemehov S., Messaoudi N., Uffelen P. V., Abderrahim H. A., 2003, “Modelling the behaviour of oxide fuels containing minor actinides with urania, thoria and zirconia matrices in an accelerator-driven system”, *Journal of Nuclear Materials*, v. 319, pp. 131–141.
- Sordo F., Abánades A., Lafuente A., Martínez-Val J.M., Perlado M., 2009, “Material selection for spallation neutron source Windows Application to PDS-XADS and XT-ADS prototypes”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 239, pp. 2573-2580.
- Sugawara T., Sarotto M., Stankovskiy A., Eynde G. V. den, 2011, “Nuclear data sensitivity/uncertainty analysis for XT-ADS”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 38, pp.: 1098–1108.
- Talamo A., Gohar Y., Aliberti G., Cao Y., Smith D., Zhong Z., Kiyavitskaya, H., Bournos V., Fokov Y., Routkovskaya C., Serafimovich I. , 2011, “MCNPX, MONK, and ERANOS analyses of the YALINA Booster subcritical assembly”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 241, pp. 1606–1615.
- Tamura, J., 2003, “Signal Fluctuation and Neutron Source in Inverse Kinetics Method for Reactivity Measurement in the Sub-critical Domain”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 40, n. 3, p. 153–157.
- Vaz P., 2009, “Neutron transport simulation (selected topics)”, *Radiation Physics and Chemistry*, v. 78, pp.: 829–842.
- Vaz P., 2010, “Monte Carlo methods and techniques status and prospects for future evolution”, *Applied Radiation and Isotopes*, in press.
- Yoriyaz H., 2009, “Monte Carlo Method: principles and applications in Medical Physics”, *Revista Brasileira de Física Médica*, v.3, n. 1, pp.141-149.
- Zhang F., Chen W., Gui X., 2008, “Analytic method study of point-reactor kinetic equation when cold start-up”, *Annals of Nuclear Energy*, .v. 35, pp. 746–749.