



CINÉTICA ESPACIAL PARA MODELAR TRANSIENTES EM REATORES
ADS

Adriano Jorge Figueira

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: Antonio Carlos Marques Alvim

Fernando Carvalho da Silva

Rio de Janeiro
Setembro de 2015

CINÉTICA ESPACIAL PARA MODELAR TRANSIENTES EM REATORES

ADS

Adriano Jorge Figueira

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. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc

Prof. José Antonio Carlos Canedo Medeiros, D.Sc

Dr. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc

Dr. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

SETEMBRO DE 2015

Figueira, Adriano Jorge

Cinética Espacial para modelar transientes em Reatores ADS/ Adriano Jorge Figueira.– Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XVI, 78 p.: il; 29,7 cm.

Orientadores: Antonio Carlos Marques Alvim

Fernando Carvalho da Silva

Tese (Doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 74-78.

1. Cinética Espacial.
2. Métodos de Direções Alternadas.
3. Reatores Nucleares Inovadores.
4. Equação da Difusão. I. Alvim, Antonio Carlos Marques, *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*“Quanto mais suor derramado em treinamento,
menos sangue será derramado em batalha.”*

(Dale Carnegie)

Este trabalho é dedicado, *in memoriam*, aos meus avós paternos: Joaquim e Ivonete. E à minha prima Aurinete Alves Marinho, que nos deixou muito cedo.

Agradecimentos

Muitas são as pessoas que tiveram, de alguma forma, contribuição positiva para que esta tese fosse finalizada. Primeiramente gostaria de agradecer a duas pessoas que são exemplo de profissionalismo e capacidade técnica, inspirando muitos estudantes e formando pesquisadores de maneira brilhante, meus orientadores: Prof. Antonio Carlos Marques Alvim e Prof. Fernando Carvalho da Silva. Agradeço também a ajuda do Prof. José Antonio Carlos Canedo Medeiros e a confiança do Prof. Paulo Fernando F. Frutuoso e Melo.

Aos companheiros de batalha que fiz no Laboratório de Métodos Numéricos do Programa de Engenharia Nuclear: Danielle, Débora, Jerônimo, Lenilson, Paulo Igor e Wemerson.

Não poderia deixar passar a enorme contribuição de toda a equipe administrativa do PEN. Os sempre disponíveis, Reginaldo Baptista de Oliveira (Regis), Josevalda Laranjeira Noronha (Dna. Jô), Liliane Oliveira da Rocha (Lili) e Washington Luiz dos Santos.

Deixo uma homenagem a dois dos meus mais fiéis amigos de longa data: Carlos Cruz e Isis Maranhão. Devo desculpas pelas inúmeras ausências e tenho de agradecer enormemente a todos os meus familiares e amigos. Em especial, aos meus pais – Juarez e Josélia, e à minha esposa – Sarah Maldonado.

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

CINÉTICA ESPACIAL PARA MODELAR TRANSIENTES EM REATORES

ADS

Adriano Jorge Figueira

Setembro/2015

Orientadores: Antonio Carlos Marques Alvim

Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

Os sistemas ADS – *Accelerator Driven Systems*, juntamente com os reatores de IV geração, têm recebido grande atenção, sobretudo devido a sua eficiência para transmutação e, eventualmente, incineração de resíduos nucleares. Trabalhos acerca dos aspectos de segurança de reatores ADS requerem fundamentalmente modelos cinéticos para a análise de transientes. Atualmente, há um número bastante reduzido de estudos envolvendo transientes nos sistemas ADS. Além disto, os poucos que existem utilizam apenas o formalismo da Cinética Pontual. Neste contexto, o presente trabalho apresenta uma proposta de aplicação do formalismo de Cinética Espacial a sistemas ADS sob transientes característicos de condições acidentais. O código computacional desenvolvido neste trabalho apresentou reprodução satisfatória de alguns resultados presentes na literatura para diferentes transientes. Os resultados obtidos estão de acordo com as expectativas do ponto de vista físico.

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

SPATIAL KINETICS TO MODELING TRANSIENTS IN ADS REACTORS

Adriano Jorge Figueira

September/2015

Advisors: Antonio Carlos Marques Alvim

Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

ADS systems – *Accelerator Driven Systems*, along with Generation IV reactors, have been receiving great attention, especially due to their capability for transmutation and eventually incineration of nuclear waste. To study ADS safety aspects, kinetic models are employed to analyze transients. Currently, there are quite a few studies involving transient in ADS systems. Moreover, these few studies make use of the point kinetics equations. In this context, this work presents a proposal to implement a space dependent kinetics formalism, the Non-Symmetric Alternating Direction Explicit method, to analyze ADS systems under transient conditions. The computer code developed in this study has satisfactorily reproduced the results in the literature for the transients tested. The results are in accordance to what should be expected from the physical point of view.

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Contexto atual dos Sistemas ADS	1
1.1.1	O núcleo subcrítico	3
1.1.2	A fonte de nêutrons	5
1.1.3	O acelerador	8
1.2	Motivação e Objetivos	9
2	Sistemas ADS e Segurança	12
2.1	Principais cenários de acidentes em sistemas ADS	12
2.1.1	Perda de vazão do refrigerante	13
2.1.2	Perda de fluido refrigerante	14
2.1.3	Alterações de intensidade no feixe de prótons	14
3	Equações da Cinética Espacial	17
3.1	Problema Inicial	17
3.2	Discretização Espacial	20
3.3	Obtenção da Forma Semidiscretizada	20
3.4	Cinética no Formalismo Matricial	26
4	Métodos de Integração no Tempo	30
4.1	Métodos de integração direta	30

4.1.1	O Método Theta	31
4.1.2	Métodos de Euler	32
4.1.3	Método de Crank-Nicolson	34
4.2	Técnicas de Divisão - Splitting Techniques	35
4.2.1	Métodos de Direções Alternadas	36
4.2.2	Direções Alternadas Implícitos	38
4.2.3	Direções Alternadas Explícitos	42
5	Metodologia	45
5.1	Cinética Espacial para Sistemas ADS	45
5.1.1	Transformação de Frequências para Sistemas ADS	47
5.1.2	Método NSADE para Sistemas ADS	48
5.2	O código desenvolvido	51
6	Resultados	55
6.1	Validação do Método	55
6.1.1	Transiente – Exemplo 1	55
6.1.2	Transiente – Exemplo 2	61
6.2	Simulação de cenários de acidentes em Sistemas ADS	66
6.2.1	Interrupções no feixe de prótons	67
6.2.2	Aumento na intensidade do feixe de prótons	70
7	Considerações Finais	72
	Referências Bibliográficas	74

Lista de Figuras

1.1	Visão geral de um reator ADS	2
1.2	Design geral do núcleo de um ADS	3
1.3	Nêutrons emitidos por próton incidente	6
2.1	Sistemas ADS refrigerados a Na e a Pb-Bi	15
3.1	Discretização Espacial com Esquema Centrado na Interface	21
5.1	Representação numérica do algoritmo da primeira etapa	50
5.2	Representação numérica do algoritmo da segunda etapa	51
5.3	Fluxograma do código KADS2D	53
6.1	Geometria 2D para o problema TWIGL	57
6.2	Comparação entre AMF e KADS2D para $t = T/4$. $\Delta t = 10^{-4} s$	58
6.3	Comparação entre AMF e KADS2D para $t = T/2$. $\Delta t = 10^{-4} s$	59
6.4	Comparação entre AMF e KADS2D para $t = 3T/4$. $\Delta t = 10^{-4} s$	60
6.5	Quadrante para o Reator TWIGL	61
6.6	Comparação GML/AML \times KADS2D para o Transiente 2. $\Delta t = 10^{-4} s$	63
6.7	Processamento de CPU normalizada pela frequência	64
6.8	Transiente 2: Evolução da Potência – KADS2D. $\Delta t = 10^{-5} s$	65
6.9	Geometria 2D para um reator tipo ADS	66
6.10	Transiente em condição de ABI	68
6.11	Transiente em condição de ABI (escala de 2 minutos)	69

6.12 Transiente em condição de ABO	71
--	----

Lista de Tabelas

6.1	Dados do Reator TWIGL – Método AMF	56
6.2	Dados do Reator TWIGL – Expansão em Polinômios de Legendre	62
6.3	Velocidade de Processamento KADS2D \times GML \times AML	64
6.4	Dados do Reator ADS – KADS2D	67
6.5	Simulação de um ABI singular	69
6.6	Simulação de um ABO singular	71

Lista de Símbolos

$C_j(\vec{r}, t)$ Densidade da j -ésima família de precursores, na posição \vec{r} e no instante t ;

$C_{j(i,j)}$ Concentração da j -ésima família de precursores de nêutrons retardados, no ponto de malha (i, j) ;

$D_g(\vec{r}, t)$ Coeficiente de difusão para os nêutrons do grupo g , na posição \vec{r} e no instante t ;

$D_g^{(I,J)}$ Coeficiente de difusão do grupo g na região (I, J) ;

$f_{gj} = \lambda_j \chi_{gj}$ Probabilidade de um precursor da j -ésima família emitir um nêutron do grupo g ;

I Matriz identidade;

k_{eff} Fator de multiplicação efetivo;

k_s Fator de multiplicação subcrítico;

M Multiplicação subcrítica;

P Potência total do reator;

P_{beam} Potência do feixe de prótons;

$S^{(I,J)}$ Intensidade da fonte externa de nêutrons na região (I, J) ;

v_g Velocidade dos nêutrons do grupo g ;

β Fração total de nêutrons retardados emitidos por fissão;

Δt_n Tamanho no n -ésimo passo no tempo;

ε_n Energia consumida por nêutron produzido pela fonte externa;

ε_f Energia liberada por nêutron gerado nas fissões;

η_n Autovalor de ordem n da matriz \mathbf{A} ;

$\mathcal{V}(\cdot)$ Da ordem de (\cdot) ;

λ_j Constante de decaimento da família de precursores j ;

Λ Tempo médio de geração;

$\bar{\nu}$ Número médio de nêutrons produzido por fissão;

ν_g Número médio de nêutrons emitidos por fissão no grupo g ;

$\omega(t)$ Frequência: Matriz diagonal cujos elementos devem ser escolhidos de maneira a retirar o máximo de dependência temporal possível de $\varphi(t)$;

$\omega_{i,j}^n$ Valor do elemento (i, j) da matriz $\omega(t)$ no instante $t = t_n$;

Ω_n Autofunção de ordem n da matriz \mathbf{A} ;

$\Sigma_{ag}(\vec{r}, t)$ Seção de choque macroscópica de absorção do grupo de energia g , na posição \vec{r} e no instante t ;

Σ_f Seção de choque macroscópica de fissão;

$\Sigma_{fg}(\vec{r}, t)$ Seção de choque macroscópica de fissão do grupo de energia g , na posição \vec{r} e no instante t ;

$\Sigma_{gg'}(\vec{r}, t)$ Produção líquida de nêutrons no grupo de energia g , devido à contribuição dos nêutrons do grupo de energia g' ;

$\Sigma_{gg'}^{(I,J)}$ Produção líquida de nêutrons no grupo de energia g , devido à contribuição dos nêutrons do grupo de energia g' , na região (I, J) ;

$\Sigma_{sg \rightarrow g'}(\vec{r}, t)$ Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo de energia g para o grupo de energia g' , na posição \vec{r} e no instante t ;

$\phi_g(\vec{r}, t)$ Fluxo escalar de nêutrons no grupo de energia g , na posição \vec{r} e no instante t ;

$\phi_{g(i,j)}$ Fluxo escalar de nêutrons do grupo de energia g , no ponto de malha (i, j) ;

φ^* Eficiência da fonte de nêutrons;

$\tilde{\varphi}(t)$ Vetor auxiliar no instante t ;

$\varphi_g^n(i, j)$ Componente referente ao grupo de energia g , do vetor auxiliar, no ponto de malha (i, j) , no início do passo de tempo t_n ;

$\varphi_g^{n+1/2}(i, j)$ Componente referente ao grupo de energia g , do vetor auxiliar, no ponto de malha (i, j) , na metade do passo de tempo t_n ;

$\Phi_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ Fluxo subcrítico;

χ_g Espectro de fissão do grupo g ;

χ_{gj} Fração dos decaimentos de precursores da j -ésima família cuja emissão de nêutrons ocorre no grupo g ;

$\tilde{\Psi}(t)$ Vetor solução no instante t .

Capítulo 1

Introdução

Reatores nucleares convencionais funcionam sem a necessidade de uma fonte externa de nêutrons, uma vez que esses são projetados para funcionar de maneira tal que o fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , seja igual a 1,0. Todavia, esse não é o caso dos reatores do tipo ADS (*Accelerator-Driven Systems*). A subcriticalidade é a principal característica deste tipo de sistema e faz com que esses reatores sejam ditos intrinsecamente seguros. O presente capítulo visa introduzir conceitos gerais ligados aos sistemas ADS, apresentar os objetivos deste trabalho e, inserido nesse contexto, justificar a pesquisa desenvolvida.

1.1 Contexto atual dos Sistemas ADS

Basicamente, há três elementos constituintes dos reatores ADS, a saber:

- Um Núcleo Subcrítico;
- Uma Fonte de Nêutrons (Alvo) e
- Um Acelerador de Partículas de Alta Energia

Cada um dos elementos supracitados representa uma disciplina específica e recebe atenção especial de diversos grupos de pesquisa em diferentes países. Dentre os países nos quais podemos encontrar projetos de grande porte, relacionados aos sistemas ADS, destacam-se Japão, Coreia do Sul, França, Itália e Estados Unidos [1].

O design de um reator ADS, como podemos observar nas figuras 1.1 e 1.2, consiste em um núcleo subcrítico dotado de um alvo de *Spallation*¹ [2]. Ao ser atingido por um feixe de prótons de alta energia, o alvo é ativado e passa a fazer o papel de fonte externa de nêutrons para o sistema subcrítico. A produção de nêutrons no alvo será descontinuada caso o acelerador deixe de produzir o feixe de prótons. Assim, o controle do reator é feito essencialmente por meio do acelerador. No entanto, estudos recentes [3] mostram que barras de controle também podem ser importantes nesses sistemas, desde que estejam operando em baixa subcriticalidade.

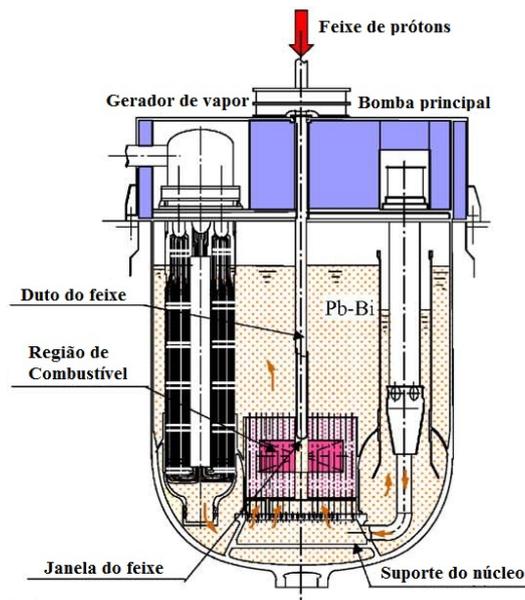


Figura 1.1: Visão geral de um reator ADS, [4]

¹Spallation é o nome dado ao processo nuclear no qual uma partícula relativística (no presente contexto, um próton) incide sobre um núcleo pesado. Esta reação libera, entre outras partículas, nêutrons. [2]

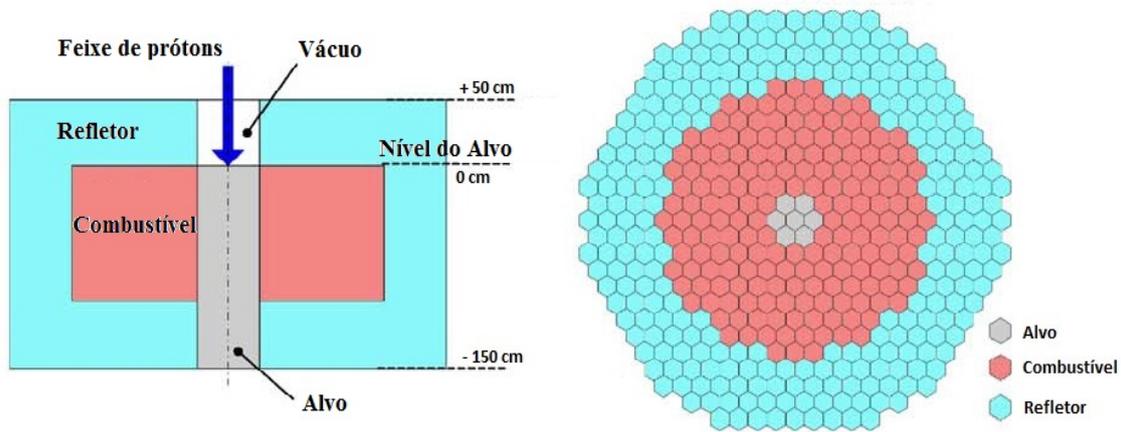


Figura 1.2: Design geral do núcleo de um ADS, [4]

1.1.1 O núcleo subcrítico

O fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , é obtido quando resolvemos a equação de balanço de nêutrons e, às vezes, empregado para expressar a subcriticalidade. Todavia, esse parâmetro não leva em conta fatores como posição ou energia da fonte. Para reatores do tipo ADS, é mais adequado a utilização do parâmetro k_s , *fator de multiplicação subcrítico*.

O fator de multiplicação subcrítico é definido como a razão entre o número de nêutrons originados de fissões e o número total de nêutrons no sistema, tanto devido às fissões quanto devido à(s) fonte(s). Mostra-se que k_s está diretamente relacionado à *multiplicação subcrítica*, M , por meio da seguinte relação [5]:

$$M = \frac{1}{1 - k_s} \quad (1.1)$$

Uma outra grandeza, relacionando k_s ao convencional k_{eff} , é a *eficiência da fonte de nêutrons*, φ^* . A eficiência da fonte corresponde ao grau de importância da fonte em relação às fissões e à potência total do sistema [6]. Em um sistema subcrítico, a potência total pode ser expressa na seguinte forma,

$$P = \frac{\overbrace{P_{beam}}^{\text{fonte externa}}}{\varepsilon_n} \left(\frac{k_s}{\bar{\nu}(1 - k_s)} \right) \varepsilon_f \quad (1.2)$$

onde P_{beam} representa a potência do feixe, enquanto ε_n , ε_f e $\bar{\nu}$ são, respectivamente, a energia consumida por nêutron produzido pela fonte externa, a energia liberada por nêutron gerado nas fissões e o número médio de nêutrons produzidos por fissão. É possível mostrar [6], para um sistema subcrítico, que a relação

$$\left(1 - \frac{1}{k_{eff}} \right) = \varphi^* \left(1 - \frac{1}{k_s} \right) \quad (1.3)$$

é satisfeita. Desta forma, utilizando a equação 1.3, a equação 1.2 assume a seguinte forma:

$$P = \left(\frac{P_{beam}}{\varepsilon_n} \right) \left(\frac{\varphi^* k_{eff}}{\bar{\nu}(1 - k_{eff})} \right) \varepsilon_f \quad (1.4)$$

Analisando a equação 1.4 vemos que, para um dado estado de subcriticalidade, podemos ajustar a potência solicitada (ou equivalentemente, a corrente elétrica) pelo acelerador de maneira a compensar uma eventual baixa eficiência da fonte. Por outro lado, uma vez escolhida a fonte, assim como sua localização no núcleo, aumentar a potência do reator significa reduzir a subcriticalidade (por exemplo, retirada de barras de controle) ou aumentar a intensidade da fonte.

Na maioria dos projetos de reatores ADS propostos atualmente, o núcleo subcrítico opera no espectro de nêutrons rápidos. Em outras palavras, em sistemas ADS não existem moderadores para termalizar os nêutrons de fissão ou de *Spallation* [3].

Para fins de geração de energia, a princípio, pode parecer que reatores críticos são a solução mais adequada, uma vez que não há necessidade de uma fonte externa. No entanto, um núcleo subcrítico aumenta consideravelmente os níveis de segurança e controlabilidade do reator. Uma vez que a operação é feita abaixo da criticalidade, os riscos de acidentes severos de excursão de potência são eliminados.

1.1.2 A fonte de nêutrons

O principal resultado do processo de *Spallation* é a geração de nêutrons. Diferentes metais pesados (ou ligas destes metais) liberam, via *spallation*, diferentes quantidades de nêutrons ao serem atingidos por prótons de diferentes faixas de altas energias. Atualmente, considera-se uma liga de Chumbo e Bismuto, conhecida como *LBE* – *Lead-Bismuth Eutectic* ($44,5\%Pb + 55,5\%Bi$) como o melhor candidato a alvo. Afora existirem outros metais pesados cuja liberação de nêutrons de *spallation* também é considerável, como o Mercúrio, o Chumbo e o Tungstênio, por exemplo, o LBE será provavelmente o alvo mais utilizado em sistemas ADS. Apesar de Bismuto produzir Polônio 210, que é, além de altamente tóxico e muito volátil, um forte emissor de partículas alfa [7], quando combinado com o Chumbo, a produção de Polônio pelo Bismuto reduz consideravelmente, uma vez que o LBE pode ser usado em temperaturas relativamente baixas [8]. Somando-se às essas condições favoráveis, diversos países, como o Japão, estão trabalhando há anos no desenvolvimento de tecnologia para o uso do LBE como alvo [9] e, nos dias atuais, há um consenso na comunidade científica de que a radiação do Polônio, devido ao alvo, não causará danos maiores à estrutura do reator. Além disto, o LBE possui alta capacidade de remoção de calor e baixo ponto de fusão [2, 9] (em torno de 398 K), o que o leva, também, à condição de futuro fluido refrigerante nos sistemas ADS.

A quantidade de nêutrons de *spallation* produzidos por próton incidente no alvo depende da energia do próton e, conseqüentemente, está relacionada ao acelerador que fornecerá o feixe. Trabalhos realizados recentemente [10, 11] mostram que o número médio de nêutrons emitidos por próton incidente é, com boa aproximação, diretamente proporcional à energia do próton, conforme podemos observar na figura 1.3. De acordo com a figura 1.3, para um alvo de 50 cm de comprimento (dimensão da ordem da esperada para aplicações industriais), em torno de 1,0 GeV de energia encontra-se o máximo de nêutrons emitidos por próton incidente e, portanto, este valor caracteriza o ponto ótimo de operação do acelerador.

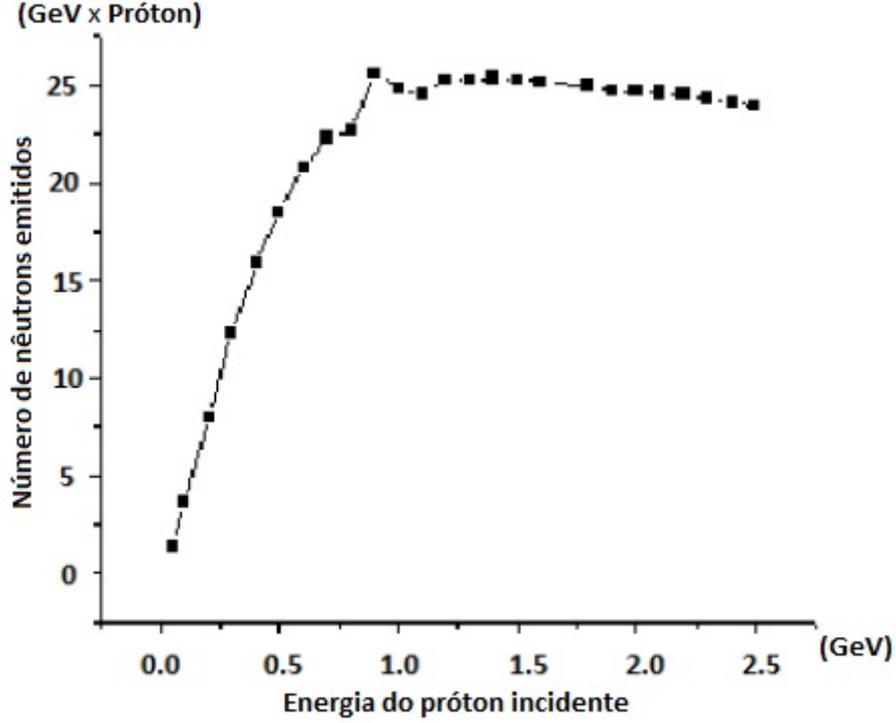


Figura 1.3: Nêutrons emitidos por unidade de energia e por próton incidente em um alvo de LBE com 30 cm de diâmetro e 50 cm de comprimento [10]

Na condição ótima de operação, para cada próton lançado pelo acelerador são produzidos cerca de 25 nêutrons através do processo de *spallation*. Esses nêutrons são gerados isotropicamente e entram na contagem do balanço de nêutrons do sistema, figurando no cálculo do fator de multiplicação subcrítico da seguinte forma:

$$k_s = \frac{\langle \mathbf{F}\Phi_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \rangle}{\langle \mathbf{M}\Phi_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \rangle} = \frac{\langle \mathbf{F}\Phi_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \rangle}{\langle \mathbf{F}\Phi_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \rangle + \langle S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \rangle} \quad (1.5)$$

onde \mathbf{F} e \mathbf{M} são, respectivamente, os operadores de fissão e de perda. Enquanto $\Phi_s(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ representa o fluxo subcrítico e $S(\vec{r}, E, \vec{\Omega})$ a intensidade da fonte de nêutrons, localizada na posição \vec{r} , com energia E e distribuição angular $\vec{\Omega}$. O símbolo $\langle \cdot \rangle$ significa integração no espaço de fase em posição, energia e ângulo.

Diferentemente do fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , que é característico da composição do núcleo, k_s depende da posição espacial, energia e distribuição angular da fonte externa (alvo) [11].

Classicamente, a equação de balanço de nêutrons para um sistema subcrítico, na formulação de operadores, assume a seguinte forma:

$$(\mathbf{M} - \mathbf{F}) \Phi = S \quad (1.6)$$

Nesta formulação, a diferença entre nêutrons produzidos por fissões ($\mathbf{F}\Phi$) e nêutrons perdidos ($\mathbf{M}\Phi$) é compensada pela fonte externa S e o modo fundamental para o fluxo de nêutrons obedece à seguinte relação:

$$\left(\mathbf{M} - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F} \right) \Phi = 0 \quad (1.7)$$

Com o uso da equação 1.6 podemos mostrar que a equação 1.5 pode ser reescrita na seguinte forma:

$$\frac{\langle \mathbf{F}\Phi_s \rangle}{\langle S \rangle} = \frac{1}{1/k_s - 1} \quad (1.8)$$

A potência nuclear, devido às fissões, é definida por

$$P_{\text{fissão}} = \varepsilon_f \langle \Sigma_f \Phi_s \rangle \quad (1.9)$$

onde Σ_f representa a seção de choque macroscópica de fissão.

Combinando as equações 1.8 e 1.9 chegamos à seguinte relação:

$$P_{\text{fissão}} = \frac{\varepsilon_f}{\bar{\nu}} \frac{k_s}{1 - k_s} \langle S \rangle \quad (1.10)$$

onde,

$$\bar{\nu} = \frac{\langle \mathbf{F}\Phi_s \rangle}{\langle \Sigma_f \Phi_s \rangle} \quad (1.11)$$

como definido anteriormente, representa o número médio de nêutrons gerados por fissão.

1.1.3 O acelerador

Tipicamente, reatores projetados em escalas industriais requerem potências nominais de operação entre 500 e 1500 MW e sistemas ADS empregam valores de k_{eff} entre 0,95 e 0,98 [11]. Aplicando a equação 1.9 a um reator ADS de 1000 MW, operando subcriticamente com $k_{eff} = 0,96$, podemos estimar a intensidade correspondente da fonte. Por simplicidade, vamos considerar que $k_s \approx k_{eff}$ (o que, em geral, é verdade).

$$\langle S \rangle = \frac{1000 \cdot 10^6 \cdot 2,5}{0,35 \cdot 10^{-10}} \left(\frac{1 - 0,96}{0,96} \right) \approx 3 \cdot 10^{18} \text{ nêutrons gerados por segundo} \quad (1.12)$$

De acordo com a seção anterior, com um feixe de prótons de energia da ordem de 1,0 GeV, um alvo de 30 cm de diâmetro e 50 cm de comprimento libera 25 nêutrons por próton incidente. Tendo em vista que o valor acima corresponde aproximadamente a um feixe que emite $1,2 \cdot 10^{17}$ prótons por segundo, o acelerador precisa fornecer uma corrente de

$$I = \frac{1,2 \cdot 10^{17} \text{ prótons}}{\text{segundo}} \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}}{\text{próton}} \approx 19 \text{ mA} \quad (1.13)$$

Em termos de potência do feixe de prótons, a corrente indicada na equação 1.13 equivale a:

$$P_{beam} = 10^9 \frac{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{\text{próton}} \frac{1,2 \cdot 10^{17} \text{ prótons}}{\text{segundo}} \approx 19 \text{ MW} \quad (1.14)$$

O grande colisor de hádrons, LHC – *Large Hadron Collider*, localizado no complexo do CERN – *European Organization for Nuclear Research*, é o maior e mais potente acelerador de partículas do mundo. Atualmente, sua capacidade é de 8 TeV distribuídos em seus 27 km de extensão. A exemplo do que vimos fazendo na presente seção, com mais uma simples estimativa, através de uma regra de três, chegamos à conclusão de que, para acelerar prótons até a energia de 1 GeV, seria necessário um pequeno LHC, com comprimento próximo a 3,4 m. Aceleradores convencionais são muito menos potentes do que o LHC, de tal maneira que o ganho de energia do feixe de prótons, por unidade de comprimento do acelerador, representa apenas uma fração da energia que seria conseguida no grande laboratório Europeu. Com isto, o acelerador de um sistema ADS viável

teria, ao menos, algumas dezenas de metros. Estas contas simples mostram que a tecnologia do acelerador constitui, aparentemente, uma barreira para a construção de um reator de potência do tipo ADS. Uma vez que as dimensões e, conseqüentemente, os custos financeiros atinentes ao acelerador fariam com que estes reatores fossem economicamente inviáveis.

Estimulados por estas limitações dos tempos atuais, grupos de pesquisa estão se dedicando ao problema da amplificação do feixe de prótons para aplicação em sistemas ADS [12]. Desta maneira, a potência solicitada pelo acelerador, assim como suas dimensões, não serão um problema à época da construção dos reatores com este tipo de tecnologia.

Enquanto não há aceleradores de pequeno porte, grande capacidade e economicamente viáveis, os atuais projetos de pesquisa e desenvolvimento ao redor do mundo estão trabalhando no sentido de aplicar aceleradores com menor capacidade, porém, dimensionalmente compatíveis com os sistemas ADS. Dentre os principais conceitos de ADS, destacam-se e servem de base para diversas pesquisas, os projetos em desenvolvimento pela IAEA – *Agência Internacional de Energia Atômica*, que serviu de base para os trabalhos [13, 14]; o OECD – *Organization for Economic Co-operation and Development*, ligado à NEA – *Nuclear Energy Agency*, [1, 15] e o projeto MYHRRA – *Multipurpose Hybrid Research Reactor for High-tech Applications*, enfatizado em [14, 16, 17].

1.2 Motivação e Objetivos

Diante de estudos previamente realizados e da avaliação de algumas pesquisas publicadas recentemente podemos observar uma forte inclinação à utilização das equações da cinética pontual para a modelagem e simulação dos sistemas ADS [18, 19, 20, 21].

Todavia, modelos realísticos requerem a inclusão de elementos não considerados por este tipo de formalismo. O design de um reator ADS portador de barras de controle, por exemplo, necessita de uma abordagem mais sólida. Tal abordagem, apesar de ainda não ter sido realizada, é possível com a aplicação da Cinética Espacial. E é justamente este o eixo central deste trabalho.

Nesta tese é apresentada uma proposta de aplicação inédita da resolução das Equações de Cinética Espacial para um sistema subcrítico acionado por fonte externa – ADS. A técnica escolhida foi o Método de Direções Alternadas Explícito Não-Simétrico, NSADE. Espera-se que o uso do formalismo espacial gere resultados mais precisos do que os atualmente disponíveis e, desta forma, auxiliem na avaliação de segurança dos sistemas ADS permitindo previsões mais eficientes do comportamento destes reatores diante de transientes.

A modelagem foi efetuada sob a perspectiva do formalismo de diferenças finitas bidimensional com esquema centrado nas interfaces de malha. Em sua implementação computacional, executada em linguagem FORTRAN, são previstas as opções de multigrupos, multirregiões e malhas retangulares não uniformes. O código desenvolvido poderá ser utilizado para gerar Benchmarks e auxiliar pesquisas futuras envolvendo não só os reatores ADS, mas sistemas críticos e subcríticos bidimensionais e retangulares em geral.

No capítulo 2 serão apresentados alguns tipos de cenários de acidentes e, posteriormente, discutiremos os transientes característicos de sistemas ADS devidos às variações na intensidade do feixe de prótons. No decorrer do capítulo 3, faremos uma breve abordagem sobre Cinética Espacial em sua formulação convencional, obtendo a forma semi-discretizada e desenvolvendo equações e definições matriciais fundamentais para a elaboração desse trabalho. Passando pelos clássicos Métodos de Euler e de Crank-Nicolson, o capítulo 4 tem sua importância caracterizada pela apresentação das *Splitting Techniques*, das quais o principal método usado nessa tese, o Método de Direções Alternadas Explícito, é uma subclasse. O capítulo 5 é dedicado à apresentação da metodologia utilizada e

do código computacional desenvolvido. Após a apresentação e discussão dos resultados, constantes no capítulo 6, o espaço para as considerações finais foi alocado no capítulo 7, seguido das referências bibliográficas.

Capítulo 2

Sistemas ADS e Segurança

O desenvolvimento de um reator ADS objetiva, além de geração altamente eficiente de energia, a transmutação de actínídeos. No escopo do projeto MYRRHA, por exemplo, as possíveis aplicações ainda vão além. A redução de resíduos nucleares, diversas aplicações médicas e farmacológicas e a reutilização do combustível nuclear fazem parte deste horizonte.

O foco do presente trabalho está direcionado aos transientes característicos dos reatores ADS. Os transientes de maior importância neste tipo de sistema são aqueles que podem acarretar um cenário acidental. Portanto, faz-se oportuno o tratamento de aspectos que envolvam, em última análise, o comportamento do núcleo frente a um cenário de risco. Esse pequeno capítulo é dedicado à apresentação qualitativa de alguns transientes característicos dos sistemas ADS, sobretudo aqueles envolvendo alterações no feixe de prótons.

2.1 Principais cenários de acidentes em sistemas ADS

Com os sistemas ADS em evidência, surgiram recentemente alguns trabalhos voltados para a avaliação desses sistemas sob algumas condições específicas. Embora a mai-

oria das pesquisas estejam relacionadas à otimização do termo de fonte, alguns autores aplicam a aproximação da cinética pontual para avaliarem condições acidentais, classicamente verificadas em reatores críticos, a sistemas ADS.

Embora alguns cenários de excursão de reatividade, ou de potência, encontrados em reatores convencionais sejam altamente improváveis em sistemas ADS, devido ao fato de que estes reatores não são autossustentáveis, os estudos de casos deste tipo é justificado se levarmos em conta que mesmo reatores projetados para serem altamente seguros e com diversos mecanismos de segurança intrínseca estão sujeitos a falha humana. Seja por imperícia ou imprudência, se for possível o aparecimento de uma condição acidental, esta condição deve ser seriamente levada em conta para a redução de eventuais consequências.

Dentre os eventos mais comumente abordados na literatura, iremos citar aqueles inerentes aos sistemas ADS. Tais eventos encontram-se citados nas subseções seguintes.

2.1.1 Perda de vazão do refrigerante

O efeito imediato da perda de vazão é o aumento demasiado da temperatura do refrigerante. Em consequência disto, as temperaturas do revestimento e do combustível também sofrem alterações. Apesar dos diversos problemas que o aumento de temperatura do fluido refrigerante pode causar, a ebulição do mesmo não constitui, a priori, mais um fator de risco no caso de sistemas refrigerados a Chumbo-Bismuto. O comportamento deste tipo de sistema foi investigado por Eriksson *et al.* e os resultados obtidos encontram-se na referência [22].

Algumas adaptações de design podem ser realizadas para reduzir os danos proporcionados por falhas nas bombas. Por exemplo, maior distância entre as varetas de combustível reduz a pressão do núcleo e, assim, facilita a circulação natural. Consequentemente, menor fração da vazão é perdida em eventuais falhas das bombas.

2.1.2 Perda de fluido refrigerante

A perda de fluido refrigerante é um efeito secundário, no sentido de que, em geral, é necessário que outros problemas tenham ocorrido no sistema previamente. Dentre os fenômenos que podem acarretar perda de fluido refrigerante podemos destacar rupturas no circuito primário e falhas no sistema de transporte de calor, que podem levar ao aparecimento de bolhas no refrigerante e/ou superaquecimento do refrigerante, levando-o à ebulição (perda através do aumento do coeficiente de vazio) ou à evaporação.

Em sistemas refrigerados a Chumbo-Bismuto a perda por evaporação do refrigerante é altamente improvável, devido ao elevado ponto de ebulição desta liga. Por outro lado, a rápida liberação de gases de fissão por meio de rupturas nas varetas de combustível pode proporcionar o aparecimento de bolhas de gases no fluido refrigerante e, novamente, o coeficiente de vazio aumenta. Outra possibilidade para o aparecimento de vazios, é a entrada de vapor de água no núcleo através de falhas no gerador de vapor, *steam generator tube rupture event* – SGTR.

Para sistemas refrigerados a Sódio, o último cenário citado pode levar a acidentes graves. O contato do Sódio com a água é acompanhado de uma violenta reação química que pode causar rupturas no sistema e, conseqüentemente, vazamento propriamente dito do fluido refrigerante, *Loss of Coolant Accident* – LOCA.

As situações citadas e outros tipos de eventos foram abordados, entre outros trabalhos, na referência [22].

2.1.3 Alterações de intensidade no feixe de prótons

Nos sistemas ADS a magnitude da fonte externa é ajustada pela mudança na intensidade do feixe de prótons, que é controlada através do acelerador de partículas. Desta forma, devido à maneira pela qual o acelerador pode alterar a intensidade do feixe, a intensidade da fonte pode mudar abruptamente, enquanto que, em reatores tradicionais, os transientes possuem velocidades limitadas. Como o tempo de adaptação dos sistemas

ADS é muito curto, sendo da ordem de alguns Λ – *tempo médio de geração* [11], a potência irá responder instantaneamente à qualquer alteração na fonte. Por outro lado, nenhum sistema de proteção pode agir instantaneamente.

Para um sistema de segurança baseado em barras de controle, por exemplo, existe um intervalo de 200 ms entre a detecção do aumento de potência e o início da inserção das barras, que dura cerca de 1 s . Esses intervalos de tempo, somados, são suficientes para detectar a inicialização de todas as condições de acidentes para reatores rápidos [11] que sempre aparecem na forma de mudanças graduais.

Alterações de intensidade no feixe de prótons podem ocorrer de duas formas. A primeira representa um pico de potência no feixe, ABO – *Accelerator Beam Overpower*. Nesta situação, a fonte externa fica mais intensa do que o esperado. O segundo caso problemático, envolvendo a intensidade do feixe oriundo do acelerador, é o ABI – *Accelerator Beam Interruptions*. Neste caso, flutuações de potência causadas por repetitivas interrupções (*trips*) do feixe podem causar fadiga térmica nos componentes do reator, acarretando falhas prematuras no sistema. Isto leva a diversos outros tipos de condições acidentais.

Esses tipos de cenários podem ser causados por falhas no sistema de controle, mal funcionamento do acelerador ou erros de operação.

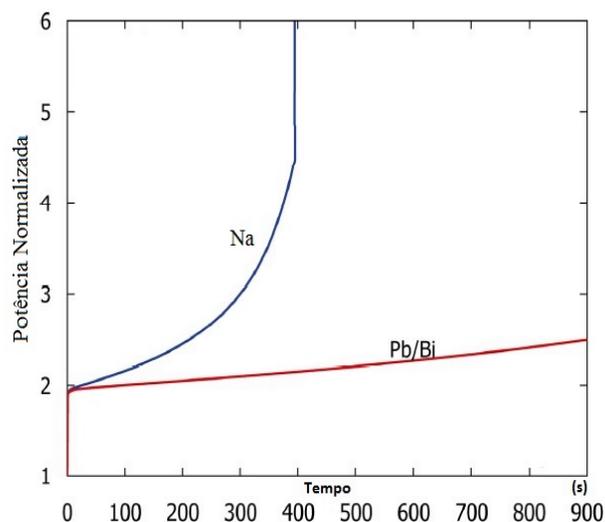


Figura 2.1: Respostas de sistemas ADS refrigerados a Na e a Pb-Bi frente a um acidente de pico de potência do feixe de prótons. [23]

Eriksson *et al* [23], analisou o comportamento de sistemas ADS sob um cenário de acidente do tipo ABO. Em seu trabalho, a resposta de sistemas refrigerados a Sódio e a LBE foram comparados entre si, quando submetidos a um aumento de 100% na intensidade do feixe. Em ambos os casos, o fator de multiplicação escolhido foi $k_{eff} = 0,97$. A intensidade da fonte começou a ser alterada no instante 1,000 s e chegou ao dobro do valor inicial no instante 1,001 s. A partir deste momento, a fonte permaneceu constante. Os resultados obtidos estão sintetizados no gráfico da figura 2.1.

O fator mais relevante para a diferença entre os comportamentos dos sistemas refrigerados a Sódio e a LBE, frente a esta alteração na fonte, encontra-se no baixo ponto de ebulição do Na (cerca de 1154 K), quando comparado ao ponto de ebulição do Chumbo-Bismuto (1943 K) e, conseqüentemente aos efeitos relacionados aos coeficientes de vazios desses materiais. Um abrupto aumento na intensidade do feixe pode acarretar na formação de bolhas, contribuindo positivamente para a reatividade em sistemas refrigerados a Sódio.

Capítulo 3

Equações da Cinética Espacial

Nos dois capítulos anteriores apresentamos de maneira sucinta as principais características dos sistemas ADS, fizemos uma breve análise dos transientes característicos desses sistemas e deixamos claro os nossos objetivos com este trabalho. Para darmos continuidade, a partir deste momento iremos voltar nossa atenção para o problema físico. Neste e nos dois capítulos seguintes, a maior parte do nosso interesse estará centralizado na modelagem matemática e nas interpretações físicas das relações construídas.

3.1 Problema Inicial

Ao considerar um sistema com G grupos de energia e \mathcal{J} famílias de precursores de nêutrons retardados, a aproximação da difusão, na teoria de transporte de nêutrons, conduz ao seguinte sistema de equações para a cinética espacial multigrupo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\vec{r}, t) &= v_g \nabla \cdot (D_g(\vec{r}, t) \nabla \phi_g(\vec{r}, t)) + v_g \sum_{g'=1}^G \Sigma_{gg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) \\ &+ v_g \sum_{j=1}^{\mathcal{J}} f_{gj} C_j(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (3.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_j(\vec{r}, t) = -\lambda_j C_j + \sum_{g'=1}^G p_{jg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) \quad (3.1b)$$

na qual,

$\phi_g(\vec{r}, t)$ é o fluxo escalar de nêutrons no grupo de energia g , na posição \vec{r} e no instante t ;

v_g é a velocidade dos nêutrons do grupo g ;

$D_g(\vec{r}, t)$ é o coeficiente de difusão para os nêutrons do grupo g , na posição \vec{r} e no instante t ;

$f_{gj} = \lambda_j \chi_{gj}$ é a probabilidade de um precursor da j -ésima família emitir um nêutron do grupo g . Onde λ_j representa a constante de decaimento da família de precursores j e χ_{gj} é a fração dos decaimentos de precursores da j -ésima família cuja emissão de nêutrons ocorre no grupo g ;

$C_j(\vec{r}, t)$ é a densidade da j -ésima família de precursores, na posição \vec{r} e no instante t .

onde $1 \leq g \leq G$ e $1 \leq j \leq \mathcal{J}$, com os parâmetros $\Sigma_{gg'}(\vec{r}, t)$ e $p_{jg'}(\vec{r}, t)$ definidos da seguinte forma:

$$\Sigma_{gg'}(\vec{r}, t) = \begin{cases} \chi_g \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\vec{r}, t) \cdot (1 - \beta) + \Sigma_{sg' \rightarrow g}(\vec{r}, t) & \text{se } g \neq g' \\ \chi_g \nu_g \Sigma_{fg}(\vec{r}, t) \cdot (1 - \beta) - \Sigma_{ag}(\vec{r}, t) - \sum_{g' \neq g} \Sigma_{sg \rightarrow g'}(\vec{r}, t) & \text{se } g = g' \end{cases} \quad (3.2)$$

e

$$p_{jg'}(\vec{r}, t) = \beta_j \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

na qual,

χ_g representa o espectro de fissão do grupo g ;

ν_g é o número médio de nêutrons emitidos por fissão no grupo g ;

β é a fração total de nêutrons retardados emitidos por fissão;

$\Sigma_{fg}(\vec{r}, t)$ é a seção de choque macroscópica de fissão do grupo de energia g , na posição \vec{r} e no instante t ;

$\Sigma_{ag}(\vec{r}, t)$ é a seção de choque macroscópica de absorção do grupo de energia g , na posição \vec{r} e no instante t ;

$\Sigma_{sg \rightarrow g'}(\vec{r}, t)$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo de energia g para o grupo de energia g' , na posição \vec{r} e no instante t ,

de maneira que $\Sigma_{gg'}(\vec{r}, t)$ expressa a produção líquida de nêutrons no grupo de energia g , devido à contribuição dos nêutrons do grupo de energia g' .

Ao definirmos o vetor coluna

$$\tilde{\theta}(\vec{r}, t) \equiv \text{col} [\phi_1(\vec{r}, t), \phi_2(\vec{r}, t), \dots, \phi_G(\vec{r}, t); C_1(\vec{r}, t), \dots, C_J(\vec{r}, t)] \quad (3.4)$$

e a matriz $M(\vec{r}, t)$,

$$M(\vec{r}, t) \equiv \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

onde,

$$M_{11}(\vec{r}, t) \equiv \begin{bmatrix} v_1(\nabla \cdot D_1 \nabla + \Sigma_{11}) & v_1 \Sigma_{12} & \cdots & v_1 \Sigma_{1G} \\ v_2 \Sigma_{21} & v_2(\nabla \cdot D_2 \nabla + \Sigma_{22}) & \cdots & v_2 \Sigma_{2G} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_G \Sigma_{G1} & v_G \Sigma_{G2} & \cdots & v_G(\nabla \cdot D_G \nabla + \Sigma_{GG}) \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

$$M_{12}(\vec{r}, t) \equiv \begin{bmatrix} v_1 f_{11} & v_1 f_{12} & \cdots & v_1 f_{1J} \\ v_2 f_{21} & v_2 f_{22} & \cdots & v_2 f_{2J} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_G f_{G1} & v_G f_{G2} & \cdots & v_G f_{GJ} \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

$$M_{21}(\vec{r}, t) \equiv \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1G} \\ p_{21} & p_{22} & \cdots & p_{2G} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{J1} & p_{J2} & \cdots & p_{JG} \end{bmatrix} \quad (3.8)$$

e

$$M_{22}(\vec{r}, t) \equiv \begin{bmatrix} -\lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -\lambda_{\mathcal{J}} \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

é possível reescrever o sistema (3.1) de maneira compacta, da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \underline{\theta}(\vec{r}, t) = M(\vec{r}, t) \underline{\theta}(\vec{r}, t) \quad (3.10)$$

A solução da equação (3.10) em casos de interesses práticos exige sua discretização espacial e temporal. O presente capítulo, através das seções seguintes, é dedicado à discussão desses procedimentos.

3.2 Discretização Espacial

Usualmente, a equação (3.10) é discretizada na variável espacial e, em seguida, na variável temporal. A discretização espacial dá origem à chamada *forma semidiscretizada*, que representa o ponto de partida para os diversos métodos de cinética espacial. Para ilustrar este processo, consideremos a discretização de um reator bidimensional qualquer e voltemos nossa atenção a um ponto genérico, cercado por quatro regiões de propriedades físicas e geométricas distintas. A situação ora citada, no formalismo de diferenças finitas e escolhendo-se um esquema de discretização centrado nas interfaces de malha, encontra-se representada na figura 3.1.

3.3 Obtenção da Forma Semidiscretizada

O primeiro passo para obter a forma semidiscretizada das equações da Cinética Espacial é integrar a equação (3.1a) na área (por unidade de comprimento) hachurada A da figura 3.1,

$$A = \frac{h_{x_{i+1}} + h_{x_i}}{2} \cdot \frac{h_{y_j} + h_{y_{j+1}}}{2} \quad (3.11)$$

A integral para o membro esquerdo na equação (3.1a) é aproximada por:

$$\iint_A \frac{\partial \phi_g(x, y, t)}{\partial t} dx dy \cong \frac{\partial \phi_g(i, j, t)}{\partial t} A \quad (3.12)$$

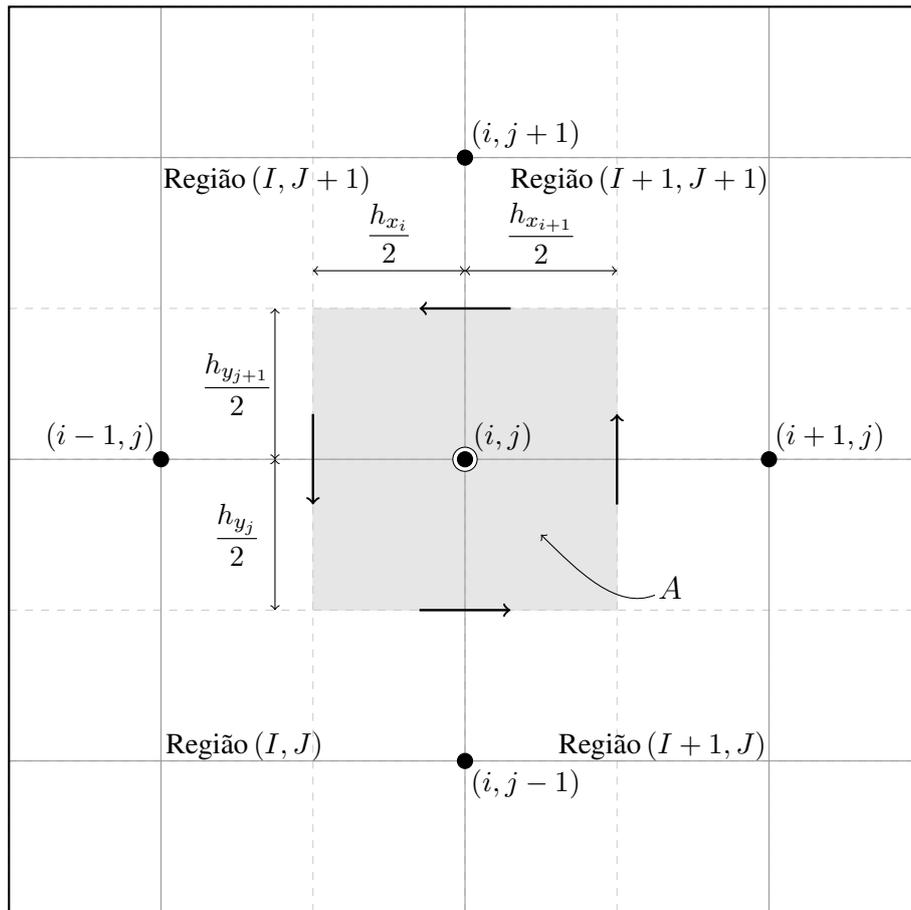


Figura 3.1: Discretização Espacial com Esquema Centrado na Interface

Procedendo a integração termo a termo teremos, para a primeira parcela do membro direito na equação (3.1a):

$$\begin{aligned}
v_g \int_{j-1/2}^{j+1/2} \int_{i-1/2}^{i+1/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \right) dx dy &= v_g \int_{j-1/2}^{j^-} \left\{ \int_{i-1/2}^{i+1/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \right) dx \right\} dy \\
&+ v_g \int_{j^+}^{j+1/2} \left\{ \int_{i-1/2}^{i+1/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \right) dx \right\} dy
\end{aligned} \tag{3.13}$$

na qual, na equação (3.13), a divisão da integral entre $j - 1/2$ e $j + 1/2$ em duas outras integrais é justificada. Pois, a densidade de corrente na direção horizontal não precisa ser contínua na direção vertical. É importante observar que, tanto na equação (3.13) quanto em outras relações deste trabalho, frequentemente fazemos uso de um relaxamento de notação ao deixar a dependência no tempo implícita. Nesta seção, por exemplo, $\phi_{g(i,j)}$ está sendo escrito em lugar de $\phi_{g(i,j)}(t)$. Isto é feito apenas para simplificar a escrita das equações, que ficariam demasiadamente grandes se escritas com todos os parâmetros, e espera-se que o leitor tenha atenção e compreenda as situações em que a dependência no tempo está implícita. O cálculo da primeira parcela da equação (3.13) nos leva a:

$$v_g \int_{j-1/2}^{j^-} \left\{ \int_{i-1/2}^{i+1/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \right) dx \right\} dy = v_g \int_{j-1/2}^{j^-} \left[D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \right]_{i-1/2}^{i+1/2} dy \tag{3.14}$$

onde utilizamos o fato de $D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x}$ ser contínua em $x = x_i$.

No intervalo ($j - 1/2 < j < j^-$), podemos usar a aproximação:

$$D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \cong \begin{cases} D_g^{(I,J)} \left(\frac{\phi_{g(i,j)} - \phi_{g(i-1,j)}}{h_{x_i}} \right) & \text{para } i \in [i - 1/2, i^-] \\ D_g^{(I+1,J)} \left(\frac{\phi_{g(i+1,j)} - \phi_{g(i,j)}}{h_{x_{i+1}}} \right) & \text{para } i \in [i^+, i + 1/2] \end{cases} \tag{3.15}$$

obtendo assim, para a primeira parcela da soma de integrais presente na equação (3.13),

o seguinte resultado:

$$v_g \int_{j-1/2}^{j^-} \int_{i-1/2}^{i+1/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \right) dx dy \cong v_g \left\{ D_g^{(I+1,J)} \left(\frac{\phi_{g(i+1,j)} - \phi_{g(i,j)}}{h_{x_{i+1}}^2} \right) h_{x_{i+1}} \frac{h_{y_j}}{2} \right. \\ \left. - D_g^{(I,J)} \left(\frac{\phi_{g(i,j)} - \phi_{g(i-1,j)}}{h_{x_i}^2} \right) h_{x_i} \frac{h_{y_j}}{2} \right\} \quad (3.16)$$

Analogamente, a segunda parcela se escreve

$$v_g \int_{j^+}^{j+1/2} \int_{i-1/2}^{i+1/2} \frac{\partial}{\partial x} \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial x} \right) dx dy \cong v_g \left\{ D_g^{(I+1,J+1)} \frac{\phi_{g(i+1,j)} - \phi_{g(i,j)}}{h_{x_{i+1}}^2} h_{x_{i+1}} \frac{h_{y_{j+1}}}{2} \right. \\ \left. - D_g^{(I,J+1)} \frac{\phi_{g(i,j)} - \phi_{g(i-1,j)}}{h_{x_i}^2} h_{x_i} \frac{h_{y_{j+1}}}{2} \right\} \quad (3.17)$$

Da mesma maneira, é possível mostrar que

$$v_g \int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \frac{\partial}{\partial y} \left(D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial y} \right) dy dx \quad (3.18)$$

nos leva a

$$v_g \int_{i-1/2}^{i^-} \left[D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial y} \right]_{j-1/2}^{j+1/2} dx \cong v_g \left\{ D_g^{(I,J+1)} \left(\frac{\phi_{g(i,j+1)} - \phi_{g(i,j)}}{h_{y_{j+1}}^2} \right) h_{y_{j+1}} \frac{h_{x_i}}{2} \right. \\ \left. - D_g^{(I,J)} \left(\frac{\phi_{g(i,j)} - \phi_{g(i,j-1)}}{h_{y_j}^2} \right) h_{y_j} \frac{h_{x_i}}{2} \right\} \quad (3.19)$$

e

$$v_g \int_{i^+}^{i+1/2} \left[D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial y} \right]_{j-1/2}^{j+1/2} dx \cong v_g \left\{ D_g^{(I+1,J+1)} \left(\frac{\phi_{g(i,j+1)} - \phi_{g(i,j)}}{h_{y_{j+1}}^2} \right) h_{y_{j+1}} \frac{h_{x_{i+1}}}{2} \right. \\ \left. - D_g^{(I+1,J)} \left(\frac{\phi_{g(i,j)} - \phi_{g(i,j-1)}}{h_{y_j}^2} \right) h_{y_j} \frac{h_{x_{i+1}}}{2} \right\} \quad (3.20)$$

O que conclui o cálculo da integral referente ao primeiro termo do membro direito na equação (3.1a).

Nas aproximações (3.19) e (3.20), conforme o que foi feito anteriormente, utilizamos o fato de $D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial y}$ ser contínua na direção vertical, mas não precisar ser contínua na direção horizontal.

Realizando agora as integrais dos outros dois termos da equação (3.1a), chegamos às expressões aproximadas:

$$v_g \sum_{g'=1}^G \int \int_A \Sigma_{gg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) dx dy \cong v_g \sum_{g'=1}^G \left\{ \Sigma_{gg'}^{(I,J)} \frac{h_{x_i}}{2} \frac{h_{y_j}}{2} + \right. \\ \left. \Sigma_{gg'}^{(I+1,J)} \frac{h_{x_{i+1}}}{2} \frac{h_{y_j}}{2} + \Sigma_{gg'}^{(I,J+1)} \frac{h_{x_i}}{2} \frac{h_{y_{j+1}}}{2} + \Sigma_{gg'}^{(I+1,J+1)} \frac{h_{x_{i+1}}}{2} \frac{h_{y_{j+1}}}{2} \right\} \phi_{g'}(\vec{r}, t) \quad (3.21)$$

e,

$$v_g \sum_{j=1}^J f_{gj} \int \int_A C_j(\vec{r}, t) dx dy \cong v_g \sum_{j=1}^J f_{gj} C_{j(i,j)} A \quad (3.22)$$

Definindo

$$\omega_{1(i,j)} \equiv \frac{h_{x_i} h_{y_j}}{D_{i,j}} \quad (3.23a)$$

$$\omega_{2(i,j)} \equiv \frac{h_{x_i} h_{y_{j+1}}}{D_{i,j}} \quad (3.23b)$$

$$\omega_{3(i,j)} \equiv \frac{h_{x_{i+1}} h_{y_j}}{D_{i,j}} \quad (3.23c)$$

$$\omega_{4(i,j)} \equiv \frac{h_{x_{i+1}} h_{y_{j+1}}}{D_{i,j}} \quad (3.23d)$$

$$D_{i,j} \equiv (h_{x_i} + h_{x_{i+1}})(h_{y_j} + h_{y_{j+1}}) = 4A \quad (3.23e)$$

de modo que

$$\sum_{k=1}^4 \omega_k(i,j) = 1 \quad (3.24)$$

podemos usar os resultados de (3.12), (3.13), (3.21) e (3.22) para escrever a equação (3.1a) discretizada no espaço, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{g(i,j)}}{\partial t} = & v_g \left[\frac{D_g^{(I+1,J)}}{h_{x_{i+1}}^2} 2\omega_3(i,j) + \frac{D_g^{(I+1,J+1)}}{h_{x_{i+1}}^2} 2\omega_4(i,j) \right] (\phi_{g(i+1,j)} - \phi_{g(i,j)}) \\ & + v_g \left[\frac{D_g^{(I,J+1)}}{h_{y_{j+1}}^2} 2\omega_2(i,j) + \frac{D_g^{(I+1,J+1)}}{h_{y_{j+1}}^2} 2\omega_4(i,j) \right] (\phi_{g(i,j+1)} - \phi_{g(i,j)}) \\ & + v_g \left[\frac{D_g^{(I,J)}}{h_{x_i}^2} 2\omega_1(i,j) + \frac{D_g^{(I,J+1)}}{h_{x_i}^2} 2\omega_2(i,j) \right] (\phi_{g(i-1,j)} - \phi_{g(i,j)}) \\ & + v_g \left[\frac{D_g^{(I,J)}}{h_{y_j}^2} 2\omega_1(i,j) + \frac{D_g^{(I+1,J)}}{h_{y_j}^2} 2\omega_3(i,j) \right] (\phi_{g(i,j-1)} - \phi_{g(i,j)}) \\ & + v_g \sum_{g'=1}^G \left[\sum_{gg'}^{(I,J)} \omega_1(i,j) + \sum_{gg'}^{(I,J+1)} \omega_2(i,j) + \sum_{gg'}^{(I+1,J)} \omega_3(i,j) + \sum_{gg'}^{(I+1,J+1)} \omega_4(i,j) \right] \\ & + v_g \sum_{j=1}^{\mathcal{J}} f_{gj} C_{j(i,j)} \end{aligned} \quad (3.25)$$

Analogamente, integrando a equação (3.1b) e dividindo pela área A , pode-se mostrar que:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{j(i,j)} = \sum_{g'=1}^G \left[p_{gg'}^{(I,J)} \omega_1 + p_{gg'}^{(I,J+1)} \omega_2 + p_{gg'}^{(I+1,J)} \omega_3 + p_{gg'}^{(I+1,J+1)} \omega_4 \right] - \lambda_j C_{j(i,j)} \quad (3.26)$$

As equações (3.25) e (3.26) podem ser escritas de maneira condensada, resultando em uma expressão da seguinte forma:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} = \mathbf{A} \tilde{\Psi} \quad (3.27)$$

A equação (3.27) é a *forma semidiscretizada* da equação matricial (3.10) e $\tilde{\Psi}$ é um vetor coluna de dimensão $N \times (G + \mathcal{J})$, onde $N = I \times J$ é o número total de pontos de malha, sendo I o número total de colunas e J o número total de linhas da malha. A matriz \mathbf{A} é uma matriz quadrada, de ordem $N \times (G + \mathcal{J})$, cuja estrutura depende da ordenação escolhida para as componentes do vetor $\tilde{\Psi}$.

3.4 Cinética no Formalismo Matricial

Dependendo do método a ser aplicado na resolução da equação (3.27), diferentes ordenações do vetor $\tilde{\Psi}$ são empregadas. Desta forma a matriz \mathbf{A} pode assumir diferentes estruturas.

Se, por exemplo, o vetor $\tilde{\Psi}$ for definido por

$$\tilde{\Psi} = col \left[\tilde{\Psi}_1, \tilde{\Psi}_2, \dots, \tilde{\Psi}_g, \dots, \tilde{\Psi}_G; \tilde{C}_1, \tilde{C}_2, \dots, \tilde{C}_j, \dots, \tilde{C}_J \right] \quad (3.28)$$

onde,

$$\tilde{\Psi}_g = col \left[\tilde{\Psi}_{g(1,1)}, \tilde{\Psi}_{g(1,2)}, \dots, \tilde{\Psi}_{g(i,j)}, \dots, \tilde{\Psi}_{g(I,J)} \right] \quad (3.29a)$$

$$\tilde{C}_j = col \left[\tilde{C}_{j(1,1)}, \tilde{C}_{j(1,2)}, \dots, \tilde{C}_{j(i,j)}, \dots, \tilde{C}_{j(I,J)} \right] \quad (3.29b)$$

então, a matriz \mathbf{A} será constituída de $(G+J)^2$ blocos de ordem N , tais que os G primeiros blocos da diagonal principal são matrizes pentadiagonais¹, enquanto que todos os outros blocos são diagonais.

Se, por outro lado, o vetor $\tilde{\Psi}$ for definido por

$$\tilde{\Psi} = col \left[\tilde{\Psi}_{(1,1)}, \tilde{\Psi}_{(1,2)}, \dots, \tilde{\Psi}_{(i,j)}, \dots, \tilde{\Psi}_{(I,J)} \right] \quad (3.30)$$

onde,

$$\tilde{\Psi}_{(i,j)} = col \left[\phi_{1(i,j)}, \phi_{2(i,j)}, \dots, \phi_{g(i,j)}, \dots, \phi_{G(i,j)}; C_{1(i,j)}, C_{2(i,j)}, \dots, C_{j(i,j)}, \dots, C_{J(i,j)} \right] \quad (3.31)$$

de maneira que os vetores $\tilde{\Psi}_{(i,j)}$ contêm os valores dos fluxos e concentrações de precursores para o ponto (i, j) e, conseqüentemente, possuem dimensão $(G+J)$, a matriz \mathbf{A} será constituída de N^2 blocos de ordem $(G+J)$. Apresentando uma estrutura bloco

¹Nos casos 1D ou 3D, essas matrizes serão tri ou heptadiagonais, respectivamente.

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & & & & & & \\ & T_{22} & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & T_{GG} & & & \\ & & & & 0 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (3.36)$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 0 & & \cdots & & 0 \\ T_{21} & 0 & & & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & & \vdots \\ T_{G1} & T_{G2} & \cdots & 0 & & & \\ P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1G} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ P_{J1} & P_{J2} & \cdots & P_{JG} & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

e

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0 & T_{12} & \cdots & T_{1G} & F_{11} & \cdots & F_{1J} \\ & 0 & \cdots & T_{2G} & F_{21} & \cdots & F_{2J} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & & & 0 & F_{G1} & \cdots & F_{GJ} \\ & & & & 0 & \cdots & 0 \\ & & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & & 0 & \cdots & & 0 \end{bmatrix} \quad (3.38)$$

É importante salientar que os coeficientes da matriz (3.33), em geral, dependem da variável tempo. Portanto, a resolução completa da forma semidiscretizada, equação (3.27), requer especial atenção quanto ao tratamento dado a essa matriz quando da discretização temporal. No capítulo seguinte iremos discutir brevemente alguns métodos tradicionais de resolução direta da equação (3.27).

Capítulo 4

Métodos de Integração no Tempo

No capítulo 3 apresentamos a *forma semidiscretizada* das equações da Cinética Espacial e discutimos brevemente as propriedades geométricas gerais do problema matricial relacionado. O presente capítulo se presta a introduzir alguns dos métodos mais classicamente empregados no processo de discretização no tempo e, conseqüentemente, resolução da equação (3.27).

4.1 Métodos de integração direta

Voltemos nossa atenção à equação semidiscretizada (3.27), a qual, para fins de visualização, é reescrita abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} = \mathbf{A} \tilde{\Psi} \quad (4.1)$$

Ao integrar ambos os membros da equação (4.1) em um intervalo de tempo discreto $\Delta t_n \equiv t_{n+1} - t_n$, poderemos escrever

$$\tilde{\Psi}^{n+1} - \tilde{\Psi}^n = \int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{A} dt \quad (4.2)$$

de maneira que se faz necessário encontrarmos expressões aproximadas para o membro direito da equação (4.2). Suponhamos uma aproximação da seguinte forma:

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \mathbf{A} dt = \Delta t_n (\mathbf{fA}) \tilde{\Psi}^{n+1} + \Delta t_n (\mathbf{gA}) \tilde{\Psi}^n \quad (4.3)$$

Na relação (4.3), \mathbf{f} e \mathbf{g} são operadores matriciais tais que

$$\mathbf{fA} + \mathbf{gA} = \mathbf{A} \quad (4.4)$$

desta forma, substituindo (4.3) em (4.2), temos que:

$$\tilde{\Psi}^{n+1} - \tilde{\Psi}^n = \Delta t_n (\mathbf{fA}) \tilde{\Psi}^{n+1} + \Delta t_n (\mathbf{gA}) \tilde{\Psi}^n \quad (4.5)$$

ou ainda:

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = [\mathbf{I} - \Delta t_n \mathbf{fA}]^{-1} [\mathbf{I} + \Delta t_n \mathbf{gA}] \tilde{\Psi}^n \quad (4.6)$$

A equação (4.6) representa um método de integração direta geral e pode ser usada para obter $\tilde{\Psi}^{n+1} = \tilde{\Psi}(t_n + 1)$ a partir da informação de $\tilde{\Psi}^n = \tilde{\Psi}(t_n)$, desde que os operadores \mathbf{f} e \mathbf{g} seja conhecidos.

4.1.1 O Método Theta

O *Método Theta* consiste em redefinir o operador \mathbf{f} como $\mathbf{f} \equiv \Theta$, onde Θ é uma matriz diagonal tal que seus elementos não-nulos satisfazem à seguinte relação:

$$0 \leq \theta_{ii} \leq 1 \quad (4.7)$$

tendo em vista esta definição, é possível reescrever (4.6) da seguinte forma:

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = [\mathbf{I} - \Delta t_n \Theta \mathbf{A}]^{-1} [\mathbf{I} + \Delta t_n (\mathbf{I} - \Theta) \mathbf{A}] \tilde{\Psi}^n \quad (4.8)$$

que é a expressão geral para o método theta.

A correta aplicação da equação (4.8) exige uma escolha cuidadosa dos coeficientes θ_{ii} , os quais, em geral variam nos grupos de energia. A escolha ótima dos θ_{ii} 's, de maneira a minimizar absolutamente os erros de truncamento inerentes ao método ainda é um problema em aberto.

4.1.2 Métodos de Euler

Os tradicionais *Métodos de Euler* podem ser derivados do Método Theta. Para ilustrar isto, escolhamos, por exemplo $\theta_{ii} = 0, \forall i$, na equação (4.8). Podemos mostrar facilmente que esta escolha resulta em um processo totalmente explícito, na forma da equação (4.9) a seguir.

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = [\mathbf{I} + \Delta t_n \mathbf{A}] \tilde{\Psi}^n \quad (4.9)$$

Conforme mencionado anteriormente, a matriz \mathbf{A} depende de t , isto é: $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$. Todavia, nos casos aqui tratados, esta dependência é expressada através da relação

$$\mathbf{A}(t) \cong \mathbf{A}(t_n) \quad (4.10)$$

isto é, estamos aproximando o valor da matriz no instante t pelo seu valor no início do intervalo de tempo considerado, de maneira que a matriz \mathbf{A} , durante determinado transiente, é representada por um histograma tal que seu valor a cada instante é admitido igual ao valor que esta teria no início daquele intervalo.

Uma escolha alternativa, seria fazer $\theta_{ii} = 1, \forall i$, na equação (4.8). Desta maneira, toma lugar um processo totalmente implícito, representado pela equação (4.11).

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = [\mathbf{I} - \Delta t_n \mathbf{A}]^{-1} \tilde{\Psi}^n \quad (4.11)$$

A equação (4.11) é o algoritmo de Euler implícito. Tanto o *Método de Euler Explícito* quanto o *Método de Euler Implícito* apresentam erros de truncamento da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t)$.

Um algoritmo totalmente explícito, como a equação (4.9), é de simples implementação computacional, enquanto que um algoritmo totalmente implícito, equação (4.11), envolve a inversão de uma matriz. Resta a dúvida: Qual método escolher?

Com o objetivo de responder a esta questão, considere uma expansão do fluxo $\tilde{\Psi}^n$ em autofunções da matriz \mathbf{A} , da seguinte forma

$$\tilde{\Psi}^n = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \Omega_n \quad (4.12)$$

onde,

$$\mathbf{A}\Omega_n = \eta_n \Omega_n \quad (4.13)$$

A substituição da expressão (4.12) na equação (4.1), resulta em

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n (1 + \eta_n \Delta t_n) \Omega_n \quad (4.14)$$

e, devido à condição de estabilidade numérica, que exige a dominância do modo fundamental dessa expansão em relação aos outros harmônicos, segue que

$$|1 + \eta_1 \Delta t_n| > |1 + \eta_n \Delta t_n|, \quad (n \geq 2) \quad (4.15)$$

Sabe-se [5] que a magnitude do autovalor para o modo fundamental é da ordem das constantes de decaimento dos precursores. Além disto, testes numéricos efetuados no decorrer deste trabalho e também citados na referencia [25] apontam para autovalores cujos módulos podem chegar a 10^7 . Sendo assim, a garantia de validade da condição (4.15) exige que escolhamos Δt da ordem de 10^{-7} . Ou seja, o esquema totalmente explícito, embora de fácil implementação, é apenas *condicionalmente estável*, uma vez que, dependendo do problema tratado, pode apresentar restrições muito severas sobre o tamanho do passo Δt_n a ser utilizado.

Analogamente, substituindo a expansão (4.12) na equação (4.11), chegamos a uma expressão do tipo

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = \sum_{n=1}^{\infty} a_n (1 - \eta_n \Delta t_n)^{-1} \Omega_n \quad (4.16)$$

e, pela condição de estabilidade

$$|(1 - \eta_1 \Delta t_n)^{-1}| > |(1 - \eta_n \Delta t_n)^{-1}|, \quad (n \geq 2) \quad (4.17)$$

concluindo que o esquema totalmente implícito possui a propriedade de ser *incondicionalmente estável* se $0 > \text{Re}\{\eta_1\} > \text{Re}\{\eta_n\}$ para $n \geq 2$. Para os casos em que $\text{Re}\{\eta_1\} > 0$ a condição de estabilidade é conseguida exigindo-se que $\tilde{\Psi}^{n+1}$ seja um *vetor positivo*. Isto implica em:

$$\Delta t_n < \frac{1}{\eta_1} \quad (4.18)$$

Esta condição só representaria uma restrição, de fato, para autovalores η_1 elevados. Porém, isto corresponde a transientes que variam muito rapidamente com o tempo e, neste caso, a adoção de pequenos passos Δt_n seria necessária de qualquer maneira e podemos dizer que, em geral, o esquema totalmente implícito é incondicionalmente estável.

Desta forma, o tempo extra de computação desprendido para efetuar a inversão da matriz em (4.11), pode ser facilmente recuperado ao usarmos incrementos de tempo maiores, fazendo com que a escolha por um esquema totalmente implícito seja vantajosa em termos de processamento.

4.1.3 Método de Crank-Nicolson

Um dos esquemas mais tradicionais, é o esquema do tipo *Crank-Nicolson*, que também pode ser obtido do Método Theta. Para tanto, tomemos $\theta_{ii} = 1/2, \forall i$, na equação (4.8). Isto nos leva à forma usual do algoritmo de Crank-Nicolson, qual seja:

$$\tilde{\Psi}^{n+1} = \left[\mathbf{I} - \frac{1}{2} \Delta t_n \mathbf{A} \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + \frac{1}{2} \Delta t_n \mathbf{A} \right] \tilde{\Psi}^n \quad (4.19)$$

Nota-se que a matriz $[\mathbf{I} - \frac{1}{2}\Delta t_n \mathbf{A}]$ possui a mesma estrutura da matriz $[\mathbf{I} - \Delta t_n \mathbf{A}]$, presente no esquema totalmente implícito, de maneira que em termos de esforço computacional, o problema é análogo. Além disso, é necessário calcular $[\mathbf{I} + \frac{1}{2}\Delta t_n \mathbf{A}] \Psi^n$. O que adiciona mais operações ao processo. Todavia, pode-se mostrar [25] que, além do algoritmo ser *incondicionalmente estável*, o erro de truncamento deste processo é da ordem de $\mathcal{O}(\Delta t^2)$. Uma justificativa heurística para este fato pode ser conseguida em termos de aproximações de *Diferenças Finitas* para o operador $\frac{\partial}{\partial t}$.

4.2 Técnicas de Divisão - Splitting Techniques

Passemos agora aos chamados *Splitting Techniques*. Conforme vimos na seção anterior, os processos cujas restrições sobre Δt são menos severas exigem a inversão de matrizes de estruturas semelhantes à da matriz (3.33), o que pode ser feito, por exemplo, via processos iterativos. Para evitar este inconveniente a escolha dos operadores \mathbf{f} e \mathbf{g} , na relação (4.3) pode ser assim procedida:

$$\mathbf{fA} = \mathbf{A}_1 \quad (4.20a)$$

$$\mathbf{gA} = \mathbf{A}_2 \quad (4.20b)$$

de forma que

$$\mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 = \mathbf{A} \quad (4.21)$$

com \mathbf{A}_1 sendo uma matriz de fácil inversão (por exemplo, diagonal ou triangular). Os métodos gerados à partir deste tipo de procedimento são chamados de *Splitting Techniques* e os conhecidos *Métodos de Direções Alternadas*, dos quais alguns serão sucintamente apresentados nas subseções seguintes, pertencem à esta classe.

4.2.1 Métodos de Direções Alternadas

Conforme mencionado anteriormente, os *Métodos de Direções Alternadas* [25], doravante denominados genericamente *ADM*, pertencem à classe de técnicas de divisão e, portanto, são construídos de tal forma que a matriz \mathbf{A} seja dividida em duas submatrizes, sendo uma destas partes, a que será invertida no decorrer do algoritmo, de fácil inversão [24]. Porém, a inversão de apenas uma parte de \mathbf{A} pode acarretar erros de truncamento inaceitavelmente grandes.

Para contornar este problema, faz-se uma mudança de variáveis na forma:

$$\tilde{\Psi}(t) = e^{\tilde{\omega}(t)} \tilde{\varphi}(t) \quad (4.22)$$

onde $\tilde{\omega}(t)$ é uma matriz diagonal cujos elementos devem ser escolhidos de maneira a retirar o máximo de dependência temporal possível de $\tilde{\varphi}(t)$. Sua dimensão é de inverso de tempo e, por conseguinte, é normalmente denominada *frequência* e a relação (4.22) é conhecida como *Transformação de Frequências*.

Substituindo (4.22) na forma semidiscretizada, equação (4.1), obtemos a forma modificada

$$\frac{d}{dt} \tilde{\varphi}(t) = e^{-\tilde{\omega}(t)} (\mathbf{A} - \tilde{\omega}(t)) e^{\tilde{\omega}(t)} \tilde{\varphi}(t) \quad (4.23)$$

onde o vetor auxiliar $\tilde{\varphi}(t)$, caso a escolha de $\tilde{\omega}(t)$ seja adequada, depende fracamente do tempo em relação ao vetor $\tilde{\Psi}(t)$. Desta forma, apesar de a matriz deste problema modificado apresentar a mesma estrutura do problema original, é possível aplicar os ADM à equação (4.23) utilizando passos de tempo consideravelmente maiores e, ao mesmo tempo, manter os erros de truncamento oriundos da inversão de apenas parte de \mathbf{A} sob controle. Uma vez resolvida a equação modificada e determinado o vetor auxiliar, podemos usar a equação (4.22), para chegarmos ao vetor $\tilde{\Psi}(t)$.

Os algoritmos para os métodos de direções alternadas tratados aqui, aplicados à equação (4.23), são obtidos dividindo-se cada passo temporal em duas partes¹ e escolhendo-se os operadores \mathbf{f} e \mathbf{g} de tal maneira que tenhamos, para o primeiro *meio passo* ou *primeira etapa*

$$\mathbf{f}(\mathbf{A} - \underline{\omega}) = \mathbf{A}_2 - \alpha\underline{\omega} \quad (4.24a)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{A} - \underline{\omega}) = \mathbf{A}_1 - \gamma\underline{\omega} \quad (4.24b)$$

e, para a *segunda etapa*

$$\mathbf{f}(\mathbf{A} - \underline{\omega}) = \mathbf{A}_4 - \alpha\underline{\omega} \quad (4.25a)$$

$$\mathbf{g}(\mathbf{A} - \underline{\omega}) = \mathbf{A}_3 - \gamma\underline{\omega} \quad (4.25b)$$

onde, nas equações (4.24) e (4.25),

$$\alpha + \gamma = 1 \quad (4.26)$$

Desta forma, a aplicação sucessiva desses operadores a um dado passo na equação (4.23), após algumas manipulações algébricas, resulta em:

$$\underline{\varphi}^{n+1} = e^{-\underline{\omega}h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_4 - \alpha\underline{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_3 - \gamma\underline{\omega}) \right] \quad (4.27)$$

$$\left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_2 - \alpha\underline{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_1 - \gamma\underline{\omega}) \right] e^{\underline{\omega}h} \underline{\varphi}^n$$

onde,

$$h \equiv \frac{1}{2} \Delta t_n \quad (4.28)$$

¹cada qual denominada *meio passo* ou *etapa*

é o *comprimento do meio passo* naquele determinado intervalo Δt_n .

A escolha adequada dos coeficientes $\omega(t)$ é um problema delicado e diferentes testes realizados por diversos autores mostram que melhores resultados são conseguidos ao se atualizar os valores de $\omega(t)$ a cada intervalo Δt_n [26, 27]. Em geral, escolhemos os valores das frequências tais que, a cada passo e em cada ponto de malha (i, j) , tenhamos:

$$\omega_{i,j}^n = \frac{1}{\Delta t_n} \ln \left(\frac{\Psi_{\bar{g}(i,j)}^n}{\Psi_{\bar{g}(i,j)}^{n-1}} \right) \quad (4.29)$$

com $\Psi_{\bar{g}(i,j)}^n$ sendo o valor da componente (i, j) do vetor $\Psi_{\bar{g}}(t)$, conforme definido em (3.29a), no passo de tempo n . Todos os grupos de energia usam a mesma frequência em determinado ponto de malha. Em geral, \bar{g} é o grupo térmico em problemas envolvendo reatores térmicos. No caso de reatores rápidos, \bar{g} é um dos grupos representativos da faixa rápida [26].

A equação (4.27), juntamente com (4.22) definem um sistema geral do qual podem ser derivados todos os métodos de direções alternadas convencionais. Vamos agora particularizar esta equação a quatro casos de interesse.

4.2.2 Direções Alternadas Implícitos

Dentre todos os ADM, talvez os *Métodos de Direções Alternadas Implícitos* sejam os mais amplamente utilizados. Uma discussão específica acerca destes métodos pode ser encontrada na referencia [28]. Porém, as linhas escritas nesta subseção terão sua base fundamentalmente na referência [24].

O Método de Direções Alternadas Implícito aparece basicamente em duas formas que, como comentado anteriormente, podem ser obtidas à partir da expressão geral (4.27).

A primeira forma que iremos apresentar é conhecida como *Método de Direções Alternadas Implícito Simétrico* ou, simplesmente, SADI, da sigla em inglês *Symmetric Alternating Direction Implicit*.

\mathbf{A}_3 e \mathbf{A}_4 , tais que:

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{U} + \mathbf{D}_x \equiv \mathbf{U}_x \quad (4.37a)$$

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{T} + \mathbf{L} + \mathbf{D}_y \equiv \mathbf{L}_y \quad (4.37b)$$

$$\mathbf{A}_3 = \mathbf{U} + \mathbf{D}_y \equiv \mathbf{U}_y \quad (4.37c)$$

$$\mathbf{A}_4 = \mathbf{T} + \mathbf{L} + \mathbf{D}_x \equiv \mathbf{L}_x \quad (4.37d)$$

Feito isto, é possível demonstrar que a relação (4.38),

$$\tilde{\varphi}^{n+1} = e^{-\omega h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{L}_x - \tilde{\omega}) \right]^{-1} [\mathbf{I} + h\mathbf{U}_y] \quad (4.38)$$

$$\left[\mathbf{I} - h(\mathbf{L}_y - \tilde{\omega}) \right]^{-1} [\mathbf{I} + h\mathbf{U}_x] e^{\omega h} \tilde{\varphi}^n$$

analogamente à equação (4.35) para o caso simétrico, constitui o algoritmo estruturante do *Método de Direções Alternadas Implícito Não-Simétrico*, o qual será abreviado por NSADI, como forma de alusão a *Non Symmetric Alternating Direction Implicit*.

Nos métodos SADI e NSADI, as matrizes \mathbf{A}_2 e \mathbf{A}_4 são ambas bloco triangular inferior ou superior com diagonal bloco tridiagonal. O que requer solução simultânea dos fluxos, linha por linha, através de algoritmos de eliminação progressiva - substituição regressiva.

Conforme podemos observar das equações (4.35) e (4.38), a cada intervalo Δt_n , durante o primeiro meio passo h apenas uma das direções é tratada explicitamente, enquanto a outra permanece implícita. Na segunda etapa, este tratamento se inverte. Por esse motivo o nome do método é *Direções Alternadas*.

4.2.3 Direções Alternadas Explícitos

Prosseguindo com nossa abordagem geral sobre ADM, os métodos de direções alternadas explícitos são gerados à partir das mesmas definições da subseção anterior. Contudo, trocando-se \mathbf{D}_x por \mathbf{D}_U e \mathbf{D}_y por \mathbf{D}_L , onde \mathbf{D}_U contém a parte superior de \mathbf{D} mais metade de sua diagonal principal, enquanto \mathbf{D}_L contém a parte inferior de \mathbf{D} mais a outra metade de sua diagonal. Ou seja, para o método de Direções Alternadas Explícito Simétrico, SADE – *Symmetric Alternating Direction Explicit*, temos as seguintes definições

$$\alpha = \gamma = 1/2 \quad (4.39)$$

e

$$\mathbf{A}_1 = \frac{1}{2}\mathbf{T} + \mathbf{U} + \mathbf{D}_U = \mathbf{A}_4 \equiv \mathbf{A}_U \quad (4.40a)$$

$$\mathbf{A}_2 = \frac{1}{2}\mathbf{T} + \mathbf{L} + \mathbf{D}_L = \mathbf{A}_3 \equiv \mathbf{A}_L \quad (4.40b)$$

cuja substituição na equação (4.27) resulta em

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}^{n+1} = e^{-\tilde{\omega}h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_U - \frac{1}{2}\tilde{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_L - \frac{1}{2}\tilde{\omega}) \right] \\ \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_L - \frac{1}{2}\tilde{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_U - \frac{1}{2}\tilde{\omega}) \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^n \end{aligned} \quad (4.41)$$

enquanto que, para o método de Direções Alternadas Explícito Não-Simétrico, NSADE – *Non Symmetric Alternating Direction Explicit*, as definições são:

$$\alpha = 1 \quad (4.42a)$$

$$\gamma = 0 \quad (4.42b)$$

e

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{U} + \mathbf{D}_U \quad (4.43a)$$

$$\mathbf{A}_2 = \mathbf{T} + \mathbf{L} + \mathbf{D}_L \quad (4.43b)$$

$$\mathbf{A}_3 = \mathbf{U} + \mathbf{D}_L \quad (4.43c)$$

$$\mathbf{A}_4 = \mathbf{T} + \mathbf{L} + \mathbf{D}_U \quad (4.43d)$$

resultando em,

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}^{n+1} = e^{-\tilde{\omega}h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_4 - \tilde{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h\mathbf{A}_3 \right] \\ \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_2 - \tilde{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h\mathbf{A}_1 \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^n \end{aligned} \quad (4.44)$$

Para ambos os métodos, SADE ou NSADE, as inversões são executadas facilmente, uma vez que tanto a matriz \mathbf{A}_2 quanto a matriz \mathbf{A}_4 são triangulares². Pelo método NSADE resolvemos os fluxos do grupo de maior energia para o grupo de menor energia em ambas as etapas. Isto, em termos de consistência física da resolução do problema caracteriza uma vantagem considerável. No caso do SADE, é necessário inverter a ordem de resolução dos fluxos na segunda etapa, resolvendo-se, a cada intervalo, primeiro de cima para baixo e, depois, de baixo para cima nos grupos de energia.

Há ainda, outros métodos de direções alternadas, como o CAD – *Checkboard Alternating Direction* e os métodos de direções alternadas modificados [24]. Porém, não iremos tratá-los aqui.

Diante de tudo que foi exposto neste capítulo e baseado nas observações [24, 26] numéricas de que, em geral, os métodos não simétricos possuem melhores condições de estabilidade, adicionando características relativas à natureza do problema de resolver as equações da Cinética Espacial, determinamos que o método NSADE é o mais adequado

²A matriz \mathbf{A}_2 é triangular inferior tanto no SADE quanto no NSADE. A matriz \mathbf{A}_4 é triangular superior em ambos.

para o tratamento dos transientes em sistemas ADS.

O próximo capítulo consolida a implementação desse método ao problema aqui proposto.

Capítulo 5

Metodologia

No presente capítulo incluiremos o termo de fonte externa à forma semidiscretizada e abordaremos o problema no âmbito do método NSADE, chegando às expressões que embasaram a implementação do algoritmo desenvolvido durante este trabalho. Ao fim, apresentaremos o fluxograma do referido código.

5.1 Cinética Espacial para Sistemas ADS

A passagem da forma convencional das equações da Cinética Espacial para uma forma aplicável aos sistemas ADS exige um termo adicional, $S_g(\vec{r}, t)$, na equação (3.1a). Este termo representa a fonte externa de nêutrons na posição \vec{r} e no instante t e, com isto, o sistema (3.1) torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\vec{r}, t) &= v_g \nabla \cdot (D_g(\vec{r}, t) \nabla \phi_g(\vec{r}, t)) + v_g \sum_{g'=1}^G \Sigma_{gg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) \\ &+ v_g \sum_{j=1}^{\mathcal{J}} f_{gj} C_j(\vec{r}, t) + v_g S_g(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (5.1a)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_j(\vec{r}, t) = -\lambda_j C_j + \sum_{g'=1}^G p_{jg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) \quad (5.1b)$$

Seguindo-se os mesmos passos descritos na seção 3.3, podemos mostrar que a equação (5.1a) toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{g(i,j)}}{\partial t} &= v_g \left[\frac{D_g^{(I+1,J)}}{h_{x_{i+1}}^2} 2\omega_{3(i,j)} + \frac{D_g^{(I+1,J+1)}}{h_{x_{i+1}}^2} 2\omega_{4(i,j)} \right] (\phi_{g(i+1,j)} - \phi_{g(i,j)}) \\ &+ v_g \left[\frac{D_g^{(I,J+1)}}{h_{y_{j+1}}^2} 2\omega_{2(i,j)} + \frac{D_g^{(I+1,J+1)}}{h_{y_{j+1}}^2} 2\omega_{4(i,j)} \right] (\phi_{g(i,j+1)} - \phi_{g(i,j)}) \\ &+ v_g \left[\frac{D_g^{(I,J)}}{h_{x_i}^2} 2\omega_{1(i,j)} + \frac{D_g^{(I,J+1)}}{h_{x_i}^2} 2\omega_{2(i,j)} \right] (\phi_{g(i-1,j)} - \phi_{g(i,j)}) \\ &+ v_g \left[\frac{D_g^{(I,J)}}{h_{y_j}^2} 2\omega_{1(i,j)} + \frac{D_g^{(I+1,J)}}{h_{y_j}^2} 2\omega_{3(i,j)} \right] (\phi_{g(i,j-1)} - \phi_{g(i,j)}) \\ &+ v_g \sum_{g'=1}^G \left[\Sigma_{gg'}^{(I,J)} \omega_{1(i,j)} + \Sigma_{gg'}^{(I,J+1)} \omega_{2(i,j)} + \Sigma_{gg'}^{(I+1,J)} \omega_{3(i,j)} + \Sigma_{gg'}^{(I+1,J+1)} \omega_{4(i,j)} \right] \\ &+ v_g \left[S^{(I,J)} \omega_{1(i,j)} + S^{(I,J+1)} \omega_{2(i,j)} + S^{(I+1,J)} \omega_{3(i,j)} + S^{(I+1,J+1)} \omega_{4(i,j)} \right] \\ &+ v_g \sum_{j=1}^{\mathcal{J}} f_{gj} C_j(i,j) \end{aligned} \quad (5.2)$$

ao passo que (3.1b) permanece inalterada, ou seja, a equação (5.1b) torna-se, após a discretização no espaço,

$$\frac{\partial}{\partial t} C_j(i,j) = \sum_{g'=1}^G \left[p_{jg'}^{(I,J)} \omega_1 + p_{jg'}^{(I,J+1)} \omega_2 + p_{jg'}^{(I+1,J)} \omega_3 + p_{jg'}^{(I+1,J+1)} \omega_4 \right] - \lambda_j C_j(i,j) \quad (5.3)$$

Analogamente ao desenvolvimento da seção 3.3, as equações (5.2) e (5.3) podem ser condensadas ao escrevermos sua forma semidiscretizada como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi} = \mathbf{A} \tilde{\Psi} + \tilde{S} \quad (5.4)$$

onde $\underline{\tilde{S}}$ é um vetor coluna de mesma dimensão que $\underline{\tilde{\Psi}}$. Porém, com apenas os seus \mathcal{J} últimos componentes identicamente nulos, de maneira que

$$\underline{\tilde{S}} = \text{col} \left[\underline{\tilde{S}}_1, \underline{\tilde{S}}_2, \dots, \underline{\tilde{S}}_g, \dots, \underline{\tilde{S}}_G; 0 \right] \quad (5.5)$$

com,

$$\underline{\tilde{S}}_g = \text{col} [S_g(1, 1), S_g(1, 2), \dots, S_g(i, j), \dots, S_g(I, J)] \quad (5.6)$$

5.1.1 Transformação de Frequências para Sistemas ADS

A introdução da Transformação de Frequências (4.22) na equação (5.4) conduz à seguinte forma modificada:

$$\frac{d}{dt} \underline{\tilde{\varphi}}(t) = e^{-\underline{\tilde{\omega}}(t)} (\mathbf{A} - \underline{\tilde{\omega}}(t)) e^{\underline{\tilde{\omega}}(t)} \underline{\tilde{\varphi}}(t) + e^{-\underline{\tilde{\omega}}(t)} \underline{\tilde{S}} \quad (5.7)$$

a qual pode ser discretizada no tempo, segundo uma abordagem de direções alternadas.

Pode-se mostrar que a aplicação dos procedimentos tratados na seção 4.2.1 nos levam à expressão geral:

$$\begin{aligned} \underline{\tilde{\varphi}}^{n+1} = & e^{-\underline{\tilde{\omega}}h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_4 - \alpha\underline{\tilde{\omega}}) \right]^{-1} \left\{ \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_3 - \gamma\underline{\tilde{\omega}}) \right] \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_2 - \alpha\underline{\tilde{\omega}}) \right]^{-1} \right. \\ & \left. \cdot \left\{ \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_1 - \gamma\underline{\tilde{\omega}}) \right] e^{\underline{\tilde{\omega}}h} \underline{\tilde{\varphi}}^n + h\underline{\tilde{S}}^n \right\} + h\underline{\tilde{S}}^{n+1/2} \right\} \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde $\underline{\tilde{S}}^n$ é o vetor fonte externa no passo temporal de ordem n e $\underline{\tilde{S}}^{n+1/2}$ é o mesmo vetor na metade do passo Δt_n , ou seja, ao final da primeira etapa. Repare que, se fizermos $\underline{\tilde{S}} = 0$ para todos os instantes a equação (5.8) resume-se a:

$$\tilde{\varphi}^{n+1} = e^{-\tilde{\omega}h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_4 - \alpha\tilde{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_3 - \gamma\tilde{\omega}) \right] \quad (5.9)$$

$$\left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_2 - \alpha\tilde{\omega}) \right]^{-1} \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_1 - \gamma\tilde{\omega}) \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^n$$

que é exatamente a expressão para o método de direções alternadas geral, obtida anteriormente na página 37. Desta forma, a equação (5.8) representa uma generalização da equação (4.27), válida também para um sistema acionado por fonte externa.

5.1.2 Método NSADE para Sistemas ADS

Para a construção do algoritmo de resolução do nosso problema, a equação (5.8) tem as duas etapas de integração explicitadas da seguinte forma:

$$\tilde{\varphi}^{n+1/2} = e^{-\tilde{\omega}h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_2 - \alpha\tilde{\omega}) \right]^{-1} \left\{ \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_1 - \gamma\tilde{\omega}) \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^n + h\tilde{S}^n \right\} \quad (5.10)$$

$$\tilde{\varphi}^{n+1} = e^{-\tilde{\omega}h} \left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_4 - \alpha\tilde{\omega}) \right]^{-1} \left\{ \left[\mathbf{I} + h(\mathbf{A}_3 - \gamma\tilde{\omega}) \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^{n+1/2} + h\tilde{S}^{n+1/2} \right\}$$

ou ainda,

$$\left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_2 - \tilde{\omega}) \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^{n+1/2} = \left[\mathbf{I} + h\mathbf{A}_1 \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^n + h\tilde{S}^n \quad (5.11a)$$

$$\left[\mathbf{I} - h(\mathbf{A}_4 - \tilde{\omega}) \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^{n+1} = \left[\mathbf{I} + h\mathbf{A}_3 \right] e^{\tilde{\omega}h} \tilde{\varphi}^{n+1/2} + h\tilde{S}^{n+1/2} \quad (5.11b)$$

onde, nas equações (5.11), já estamos levando em conta que o método é assimétrico ($\alpha = 1$ e $\gamma = 0$). A construção das matrizes \mathbf{A}_1 , \mathbf{A}_2 , \mathbf{A}_3 e \mathbf{A}_4 foi feita exatamente conforme definidas em (4.43), de maneira que estas matrizes, tendo em vista as definições introduzidas na seção 3.4, apresentam estruturas do tipo:

e,

$$\mathbf{A}_4 = \left[\begin{array}{cccc} \text{---} & & & \\ \text{---} & \text{---} & & \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} & \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} & \text{---} \end{array} \right] \quad (5.15)$$

Para a primeira etapa de cada passo, equação (5.11a), mostra-se que, no algoritmo resultante, a componente (i, j) do vetor $\varphi^{n+1/2}$ depende de suas componentes abaixo e à esquerda, no instante atual. Isto é, para calcularmos $\varphi_g^{n+1/2}(i, j)$ precisamos das informações tanto de $\varphi_g^{n+1/2}(i-1, j)$ quanto de $\varphi_g^{n+1/2}(i, j-1)$, além da própria componente e dos vizinhos à direita e acima, ambos no instante anterior, $\varphi_g^n(i, j)$, $\varphi_g^n(i+1, j)$ e $\varphi_g^n(i, j+1)$. Uma ilustração desta situação pode ser observada na figura 5.1.

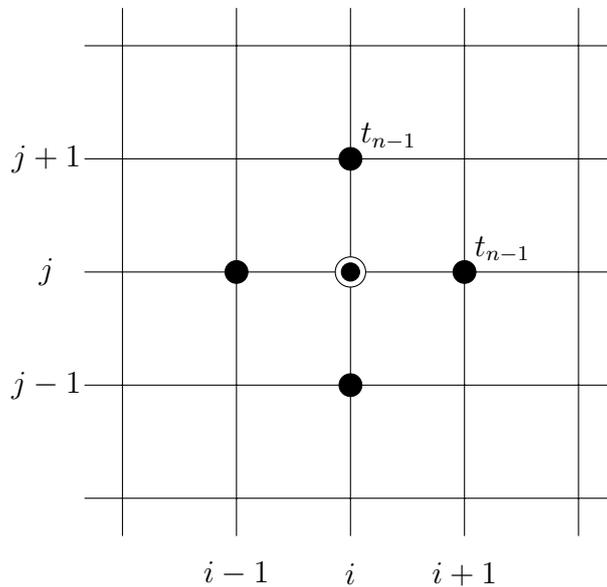


Figura 5.1: Representação numérica do algoritmo da primeira etapa

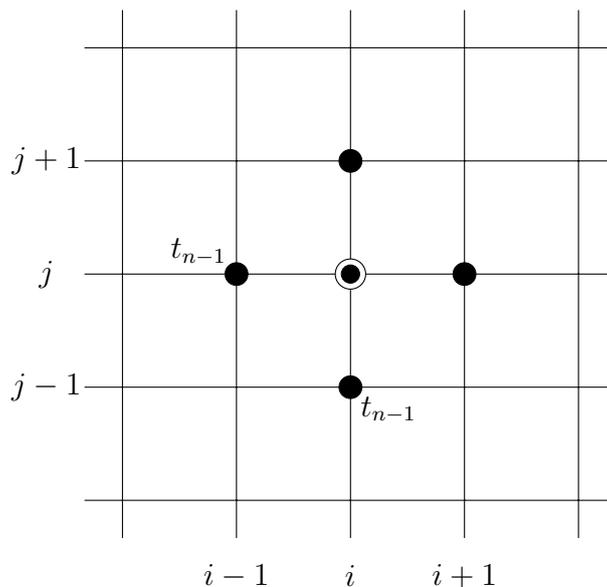


Figura 5.2: Representação numérica do algoritmo da segunda etapa

De forma completamente análoga, a figura 5.2 representa o caso da segunda etapa de execução de determinado passo do algoritmo, na qual a obtenção de cada componente (i, j) do vetor φ^{n+1} depende do seu próprio valor no instante anterior, além dos valores anteriores das componentes localizadas imediatamente à esquerda e abaixo do ponto (i, j)

O nosso problema pressupõe *condição de fluxo nulo em todo o contorno* do sistema. Sendo assim, as soluções numéricas de ambas as etapas do processo podem ser consideravelmente facilitadas ao executarmos as varreduras espaciais da esquerda para a direita e de baixo para cima no decorrer da primeira etapa, invertendo totalmente esta ordem no decorrer da segunda etapa. Este simples procedimento evita a necessidade de inversão numérica de qualquer operador.

5.2 O código desenvolvido

Para implementar a resolução da cinética espacial utilizando o método NSADE, em um sistema bidimensional do tipo ADS, foi desenvolvido um código computacional em linguagem FORTRAN, batizado de KADS2D. Com este código foi possível reproduzir

as soluções de referência dos casos estudados. Os parâmetros geométricos e nucleares, assim como os dados referentes à fonte, são lidos de um arquivo externo. As informações relevantes acerca da fonte são: o instante em que a fonte é ligada (acelerador acionado); instante em que a fonte é desligada (acelerador desligado); quantidade e duração de cada tipo de possível condição acidental no acelerador (ou *Accelerator Beam Interruptions – ABI* ou *Accelerator Beam Overpower – ABO*); instantes em que ocorrem cada uma destas condições acidentais; amplitude e frequência do feixe de prótons; fator pelo qual a intensidade do feixe será multiplicada em caso de ABO e, por último mas não menos importante, o número médio de nêutrons emitidos pelo alvo, por próton incidente.

Uma vez que o KADS2D foi desenvolvido para o tratamento em multigrupos de energia, também são dados de entrada, a quantidade de grupos e o número de famílias de precursores de nêutrons retardados, assim como os parâmetros diretamente vinculados a estes fatores.

As distribuições iniciais dos fluxos e dos precursores de nêutrons retardados foram geradas através do modelo *Falso Transitório*, às vezes chamado de *Falso Transiente* ou *False Time Step*.

Na figura 5.3 ilustramos um resumido fluxograma do código KADS2D. Há essencialmente dois regimes de processamento. O usuário define o regime nos dados de entrada, ao informar se o código irá rodar um problema com fonte externa – Sistema ADS, ou um problema com outro transiente qualquer. No primeiro caso, a cada instante, a rotina de cálculo dos fluxos tem a informação atualizada sob o estado da fonte externa, processando as operações pertinentes e repassando esses dados para a rotina de cálculo da potência. A rotina Cálculo da Fonte Externa executa suas operações com base no instante t que lhe é repassado e nas informações armazenadas no arquivo de entrada, fornecendo assim, uma saída com o valor correto da fonte externa naquele instante, a qual será usada para recalculer os fluxos e o ciclo continua até que o número de passos no tempo atinja o seu ponto final.

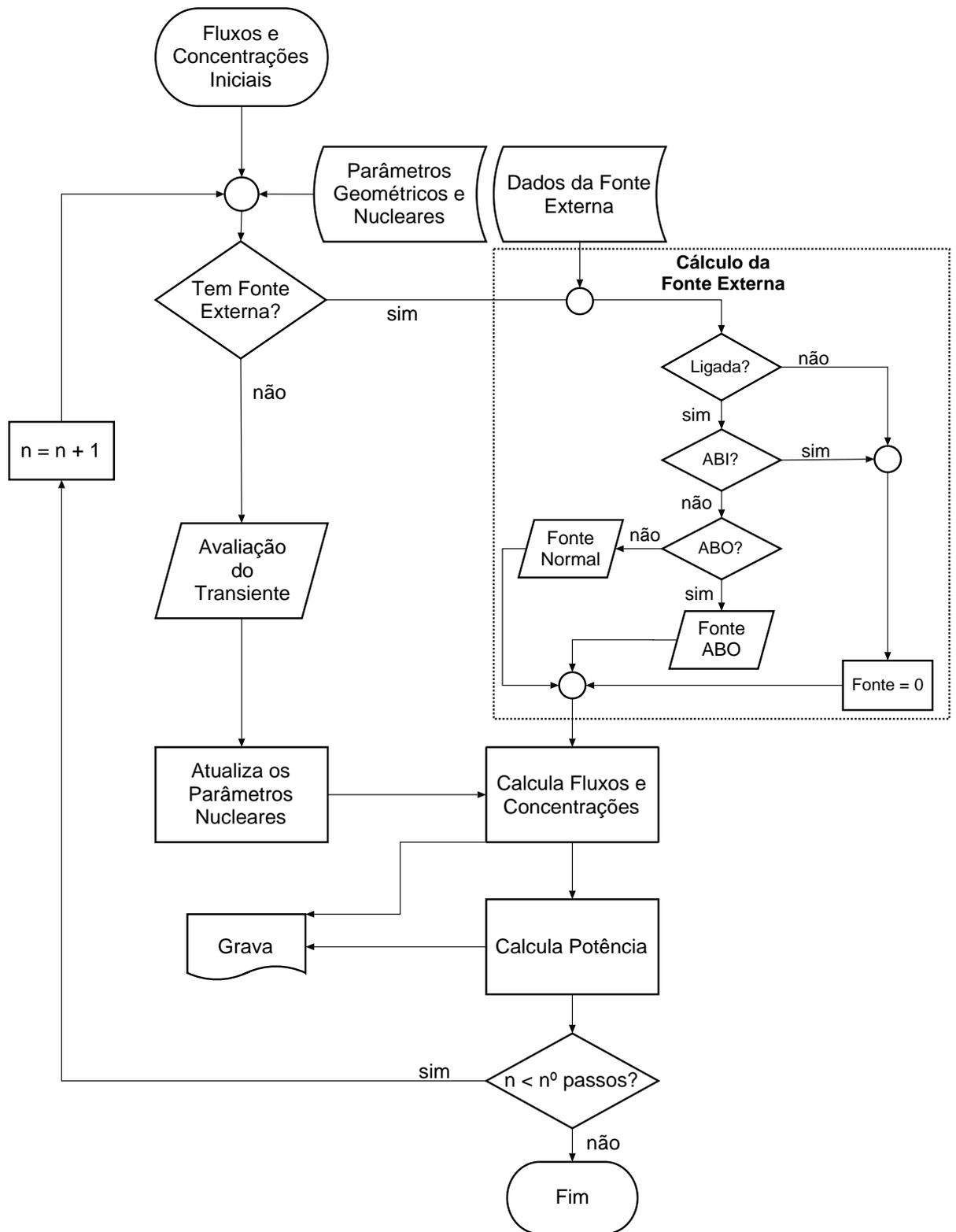


Figura 5.3: Fluxograma do código KADS2D

O segundo regime de processamento está presente especialmente para validação do código. Neste caso, como não há fonte externa, o ciclo é desviado para as rotinas de avaliação do transiente de interesse e atualização dos parâmetros nucleares antes do efetivo cálculo dos fluxos e posterior avaliação da potência. Até que a quantidade de ciclos seja atingida este processo de atualização de parâmetros - cálculo dos fluxos/potência se repete. Todo o histórico do feixe de prótons e da intensidade da fonte é gravado em um arquivo externo. Ao final do processo, também temos arquivos que contêm as distribuições dos fluxos de cada grupo de energia e a distribuição das concentrações de cada família de precursores, além de outros arquivos contendo informações de controle.

Capítulo 6

Resultados

Diante das fundamentações teóricas antes discutidas e da metodologia apresentada no capítulo precedente, neste ponto da tese o código KADS2D será utilizado para modelar alguns transientes, inclusive em reatores do tipo ADS. Infelizmente não há, na literatura atual, estudos nos quais possamos encontrar resultados de simulações de transientes específicos dos reatores ADS, tais como flutuações do feixe de prótons. Com isto, ao simularmos as variações da fonte externa não teremos um controle com o qual comparar nossos resultados. Em contrapartida, poderemos observar que o KADS2D reproduz de maneira bastante satisfatória outros transientes em sistemas subcríticos.

6.1 Validação do Método

6.1.1 Transiente – Exemplo 1

O primeiro transiente testado aqui foi um dos casos tratados na referência [29]. No referido trabalho, os autores resolvem as equações da cinética espacial para um sistema subcrítico bidimensional através de uma técnica denominada de *Adaptive Matrix Formation* – AMF. Os dados relativos a este sistema encontram-se listados na tabela 6.1.

Tabela 6.1: Transiente 1: Dados para o Reator TWIGL [29] (dois grupos de energia e uma família de precursores)

Propriedade	Materiais 1 e 2		Material 3	
	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 1	Grupo 2
D (cm)	1,4	0,4	1,3	0,2
Σ_a (cm^{-1})	0,01	0,15	0,008	0,05
ν	2,1877	2,1877	2,1877	2,1877
Σ_f (cm^{-1})	0,0035	0,1	0,0015	0,03
$\Sigma_s^{g \rightarrow g+1}$ (cm^{-1})	0,01	0,0	0,01	0,0
Velocidade (cm/s)	$1,0 \times 10^7$	$2,0 \times 10^5$	$1,0 \times 10^7$	$2,0 \times 10^5$
Espectro de Fissão	1,0	0,0	1,0	0,0
Constantes dos Precursores	$f_{11} = 1,0$ $\lambda_1 = 0,08$		$f_{21} = 0,0$ $\beta_1 = 0,0075$	
Condições de Contorno	$\phi_1 = 0$ e $\phi_2 = 0$ em $x = (0, 160)$ cm e $y = (0, 160)$ cm			

Uma ilustração do reator considerado pode ser vista na figura 6.1. Neste caso, uma perturbação sinusoidal de período $T = 10^{-2}$ s, conforme a equação (6.1), é introduzida sobre a seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico apenas nas regiões de tipo 1 e os perfis desses fluxos foram plotados para os instantes $t = T/4$, $t = T/2$ e $t = 3T/4$.

$$\Sigma_{a2}(t) = \Sigma_{a2}(0) \left(1,0 - 0,2 \sin \left(\frac{2\pi t}{T} \right) \right) \quad (6.1)$$

Da mesma maneira, os dados da tabela 6.1 e a geometria da figura 6.1 foram usados para alimentar o KADS2D. A observação das figuras 6.2, 6.3 e 6.4 nos permite afirmar que os fluxos calculados com o KADS2D concordam plenamente com os resultados do AMF [29], a menos de uma constante de normalização.

Todas as simulações com o KADS2D foram realizadas em um notebook pessoal configurado para operar com frequência máxima de 1,65 GHz e utilizar até 3 Gb de memória RAM. As simulações com o método AMF foram realizadas em um computador de mesa, munido de um processador Pentium IV de 2,6 MHz [29].

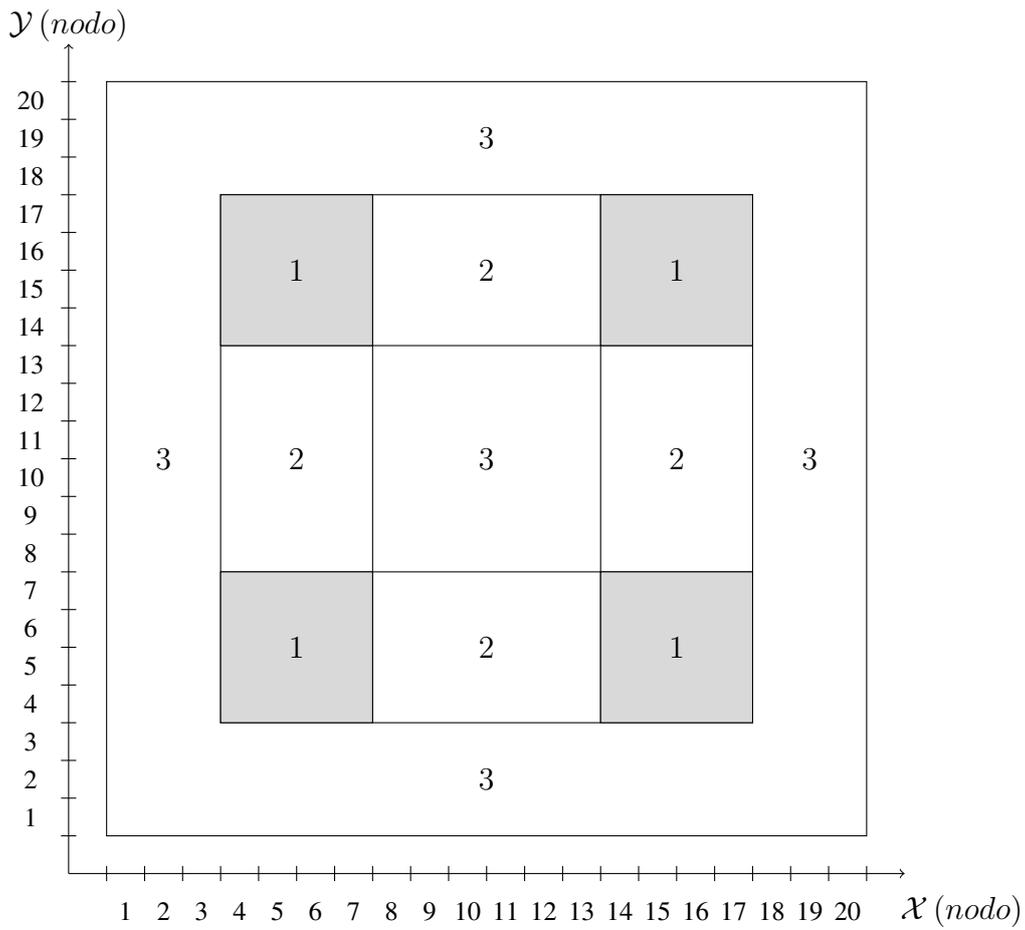
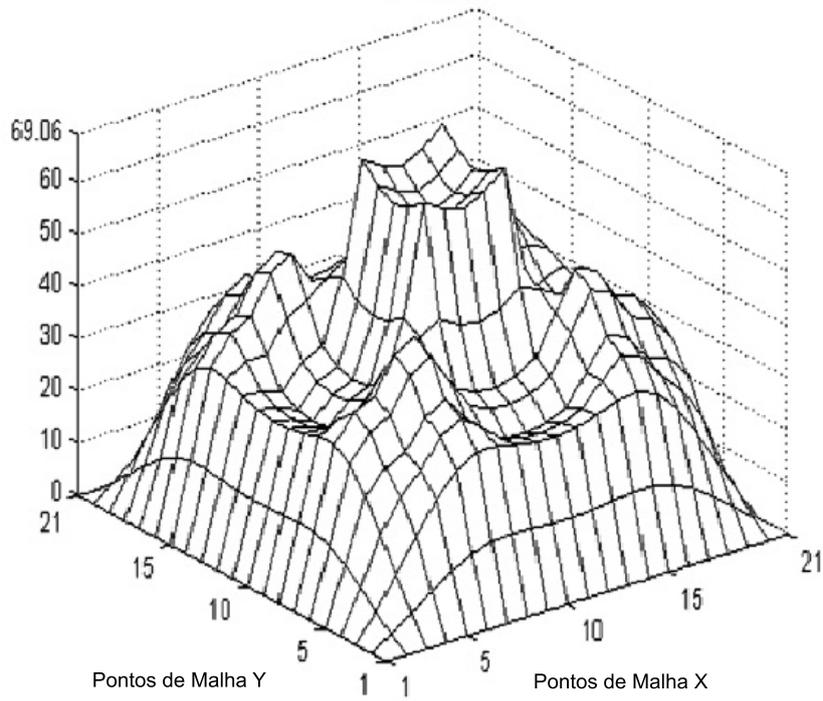


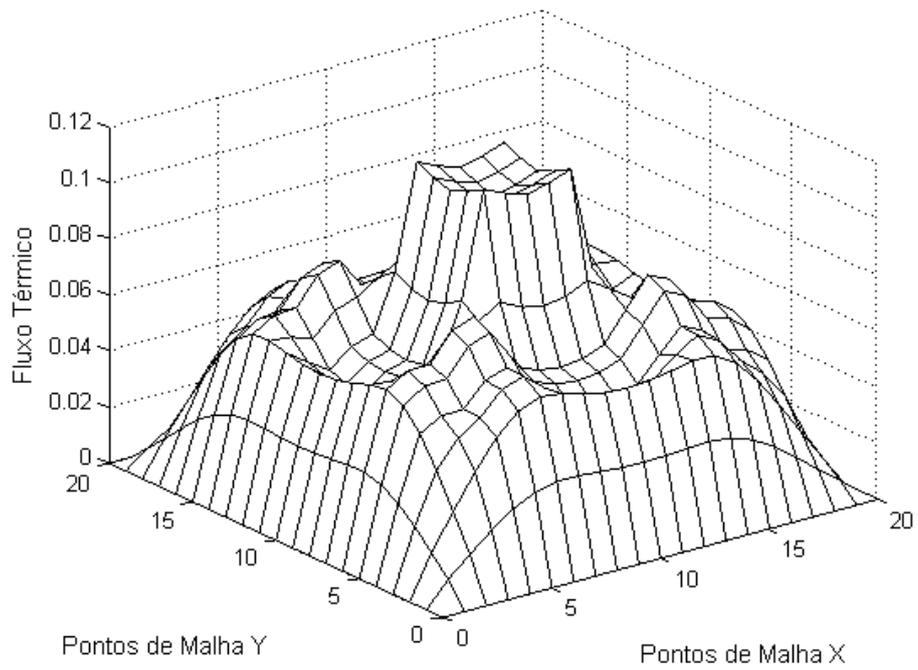
Figura 6.1: Geometria 2D para o problema TWIGL ($\Delta x = 8.0cm$, $\Delta y = 8.0cm$: 1 – Região perturbada; 2 – Núcleo; 3 – Região do cobertor), [29]

Para a obtenção do fluxo térmico representado na figura 6.2, o código KADS2D consumiu 0,125s. No caso da figura 6.3, o tempo gasto foi de 0,219s, ao passo que o cálculo do perfil do fluxo térmico em $3T/4$, representado na figura 6.4, demorou 0,281s. Cabe comentar que, em todos esses casos, o processamento do KADS2D forneceu, além do perfil do fluxo térmico: o fluxo rápido, a distribuição das concentrações dos precursores de nêutrons retardados e o histórico da potência. Nos tempos de processamento citados estão embutidos ainda: o tempo gasto para executar a nodalização do sistema e o tempo gasto para gerar as condições iniciais, através do falso transiente.

Na próxima seção iremos analisar um outro transiente, simulado em outra referência. Nesta oportunidade, nossa atenção estará voltada não para a forma do fluxo, e sim para a potência normalizada.

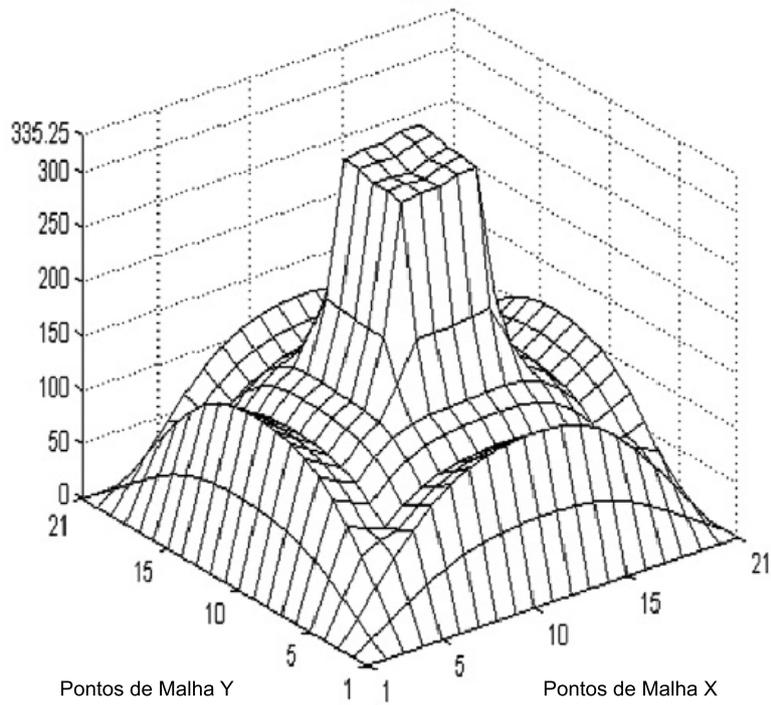


(a) Transiente 1: Perfil do fluxo térmico em $t = T/4$ – AMF

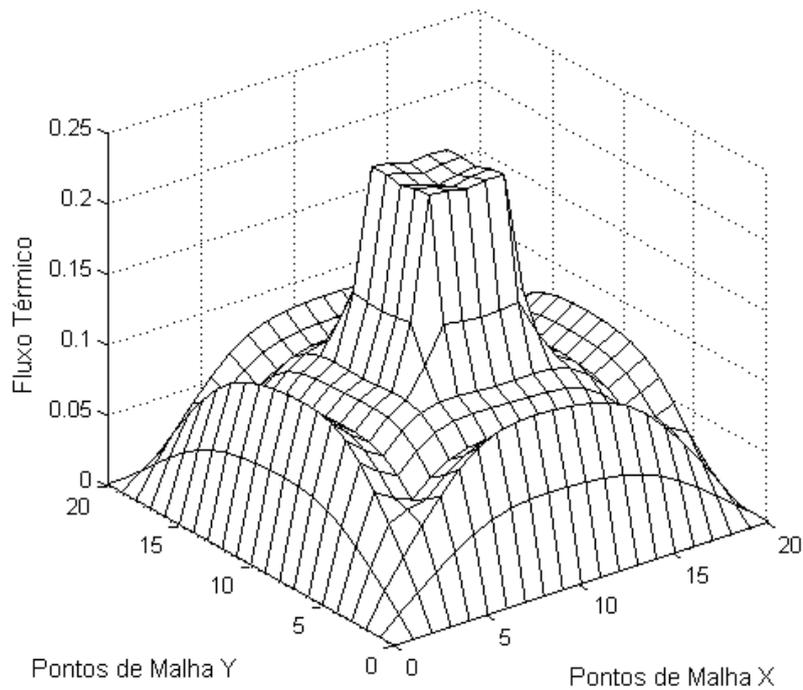


(b) Transiente 1: Perfil do fluxo térmico em $t = T/4$ – KADS2D.

Figura 6.2: Comparação entre AMF e KADS2D para $t = T/4$. $\Delta t = 10^{-4} s$

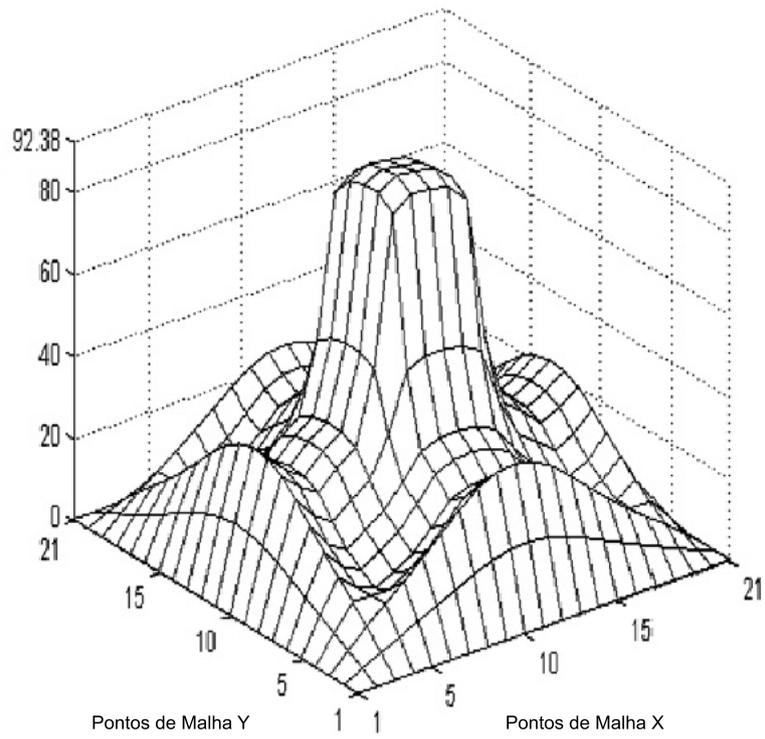


(a) Transiente 1: Perfil do fluxo térmico em $t = T/2$ - AMF

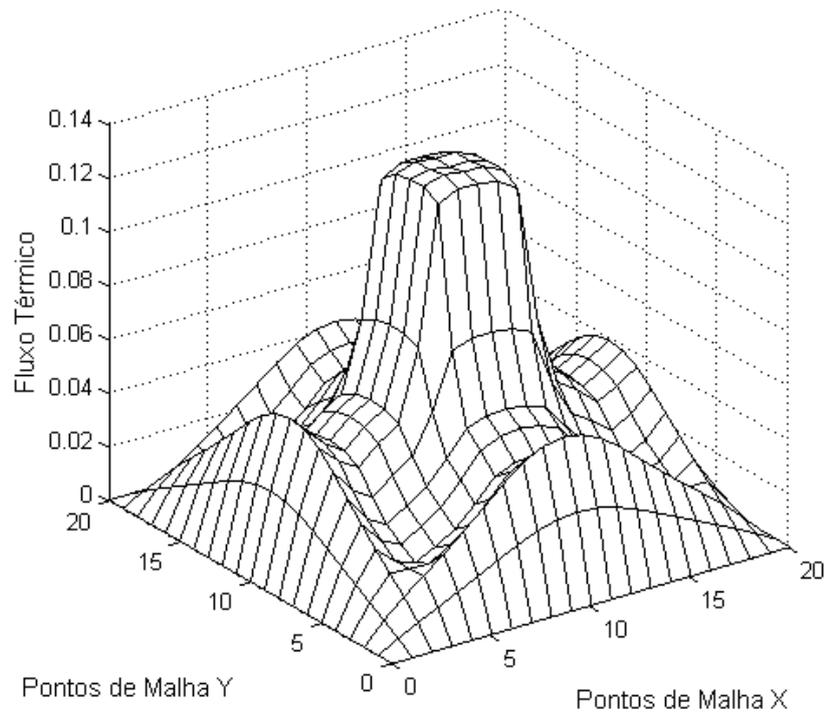


(b) Transiente 1: Perfil do fluxo térmico em $t = T/2$ - KADS2D.

Figura 6.3: Comparação entre AMF e KADS2D para $t = T/2$. $\Delta t = 10^{-4} s$



(a) Transiente 1: Perfil do fluxo térmico em $t = 3T/4$ – AMF



(b) Transiente 1: Perfil do fluxo térmico em $t = 3T/4$ – KADS2D.

Figura 6.4: Comparação entre AMF e KADS2D para $t = 3T/4$. $\Delta t = 10^{-4} s$

6.1.2 Transiente – Exemplo 2

O segundo tipo de transiente testado neste trabalho acarreta em gradientes mais acentuados dos fluxos de nêutrons. Este problema foi estudado na referência [30] para um caso particular de dois grupos de energia e uma família de precursores de nêutrons retardados. A geometria e os parâmetros neutrônicos estão representados pela figura 6.5 e pela tabela 6.2. Neste problema os autores aplicam, para a discretização espacial, uma versão modificada do método *NCM – Nodal Collocation Method* [30, 31, 32], expandindo os fluxos de nêutrons em polinômios de Legendre. Duas estratégias de resolução do sistema resultante são usadas. A primeira delas chama-se *Geometric Multilevel Strategy – GML*, fundamentada em determinar a solução do sistema para o instante t_{n+1} usando $k+1$ polinômios de Legendre, enquanto a segunda é denominada *Algebraic Multilevel Algorithm – AML*, que encontra-se, assim como a GML, plenamente detalhada na referência [30].

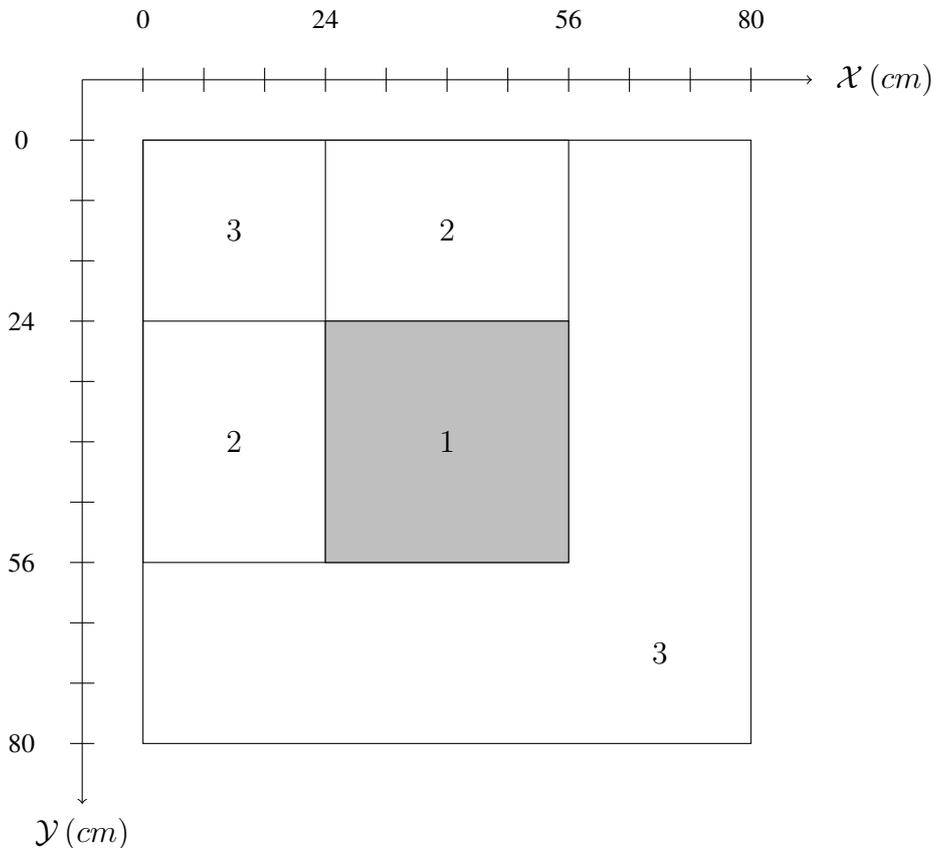


Figura 6.5: Simetria de 1/4 de núcleo para o Reator TWIGL (1 – Região perturbada; 2 – Núcleo; 3 – Região do cobertor), [30]

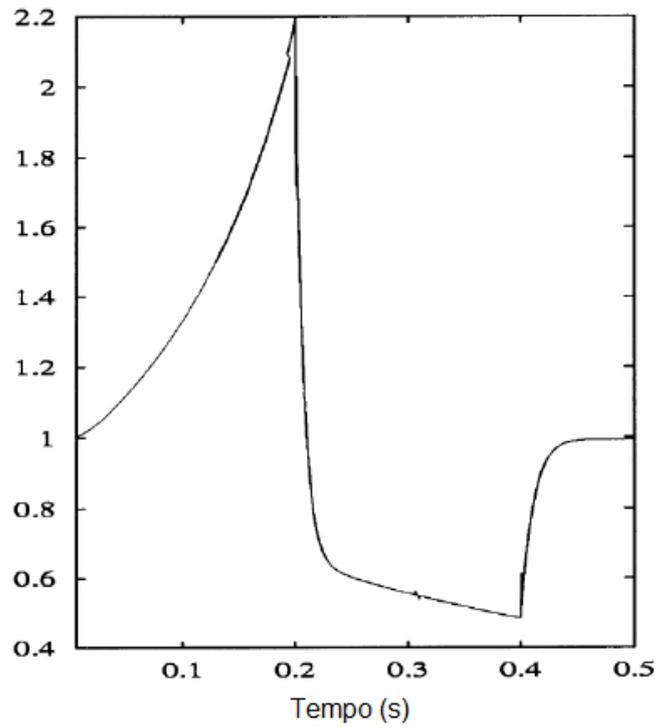
Tabela 6.2: Transiente 2: Dados para o Reator TWIGL [30] (dois grupos de energia e uma família de precursores)

Região	Grupo	$D_g (cm)$	$\Sigma_{ag} (cm^{-1})$	$\nu\Sigma_{fg}$	Σ_{12}
1	1	1,4	0,01	0,007	0,01
	2	0,4	0,15	0,2	
2	1	1,4	0,01	0,007	0,01
	2	0,4	0,15	0,2	
3	1	1,3	0,008	0,003	0,01
	2	0,5	0,05	0,06	
β_1	λ_1	$1/v_1$	$1/v_2$		
0,0064	0,08	10^{-7}	10^{-5}		

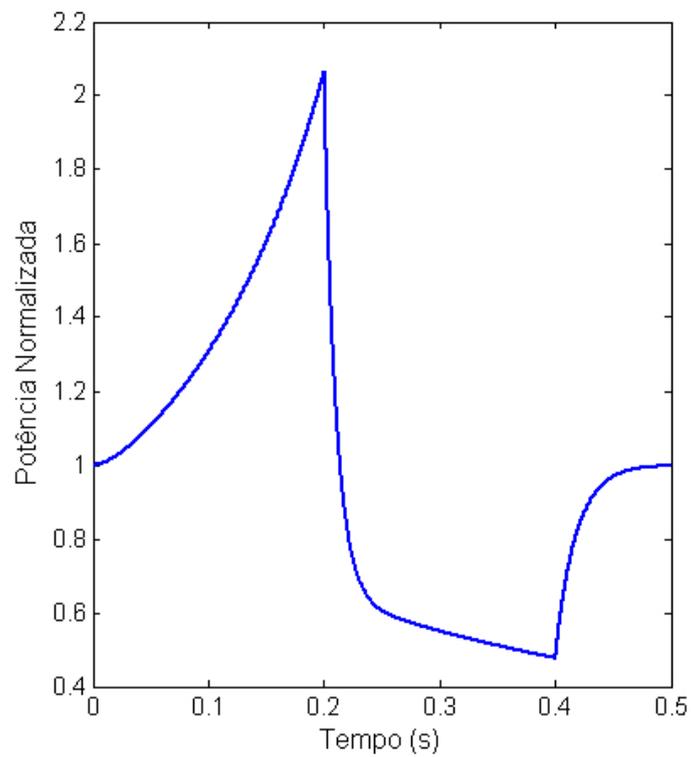
A perturbação representada pela equação (6.2) é aplicada à região de tipo 1 durante um transiente de 0.5 s. A potência relativa obtida na referência [30] foi comparada com a potência relativa gerada através da aplicação do KADS2D para esta nova situação. Os resultados são mostrados na figura 6.6.

$$\Sigma_{a2}(t) = \begin{cases} 0,15 - \frac{0,0035}{0,2}t & , t \leq 0,2 \\ 0,15 + \frac{0,0035}{0,2}t & , 0,2 < t \leq 0,4 \\ 0,15 & , t > 0,4 \end{cases} \quad (6.2)$$

Os tempos de processamento no KADS2D foram comparados com os correspondentes tempos dos algoritmos AML e GML usando dados fornecidos na referência [30] para alguns valores de Δt . Os resultados numéricos destas comparações constam na tabela 6.3, enquanto que a figura 6.7 ilustra como o tempo gasto por cada CPU, normalizado pela frequência de operação de cada processador, varia em função do tamanho do passo Δt . De acordo com a figura 6.7 observa-se que, para passos menores, o tempo de processamento do KADS2D ocupa uma posição intermediária em relação aos algoritmos AML e GML. Conforme usa-se passos maiores, o processamento do KADS2D torna-se o mais rápido entre os três.



(a) Transiente 2: Evolução da Potência – GML/AML, [30]



(b) Transiente 2: Evolução da Potência – KADS2D

Figura 6.6: Comparação GML/AML \times KADS2D para o Transiente 2. $\Delta t = 10^{-4} s$

Tabela 6.3: Transiente 2: Comparação entre GML, AML e KADS2D segundo os tempos de processamento – T_{CPU} e o tamanho do passo – Δt

GML		AML		KADS2D	
$\Delta t(s)$	$T_{CPU}(s)$	$\Delta t(s)$	$T_{CPU}(s)$	$\Delta t(s)$	$T_{CPU}(s)$
10^{-2}	76	10^{-2}	111	10^{-2}	0.1
				$5 \cdot 10^{-3}$	0.2
				10^{-3}	1.1
$5 \cdot 10^{-3}$	108	$5 \cdot 10^{-3}$	189	$5 \cdot 10^{-4}$	2.2
				10^{-4}	10.5
10^{-3}	387	10^{-3}	795	$5 \cdot 10^{-5}$	21.6
				10^{-5}	119.4

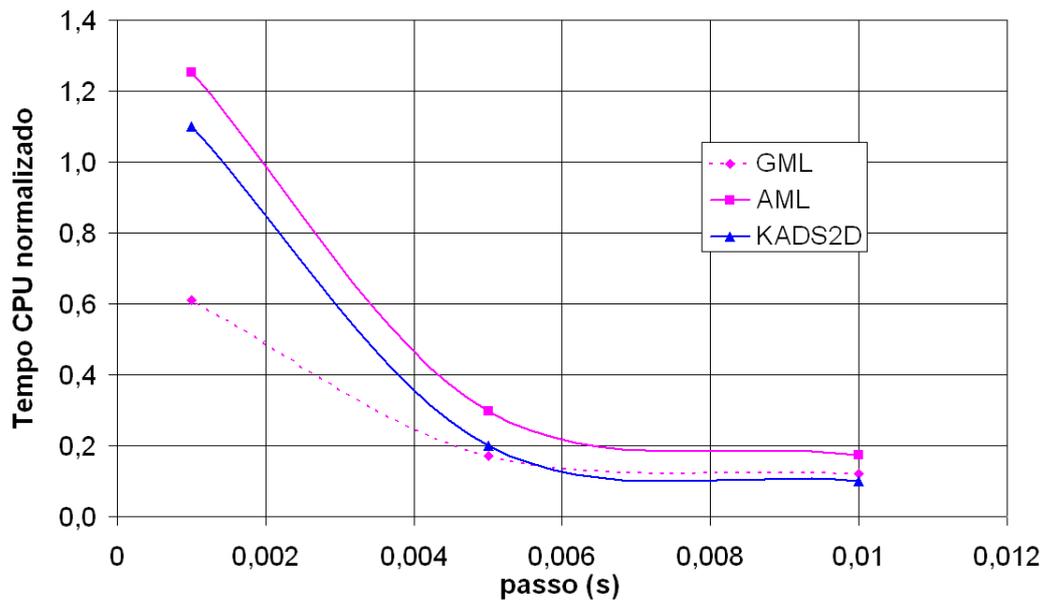


Figura 6.7: Transiente 2: Comparação entre GML, AML e KADS2D segundo os tempos de processamento normalizados pela frequência, em função do passo Δt

Uma observação mais atenta da figura 6.6 pode ser reveladora. A variação da potência parece ser amortecida quando efetuada pelo KADS2D. Este efeito ocorre devido à contribuição da rigidez do sistema de equações da Cinética Espacial [33], ocasionado pela grande diferença entre os valores absolutos dos parâmetros do sistema, principalmente no instante $t = 2$ s, quando ocorre uma brusca variação da seção de choque de absorção. Um refinamento sucessivo da malha do tempo possibilita a quebra dessa rigidez e consequente reprodução exata do resultado da figura 6.6a. A figura 6.8 ilustra o resultado obtido com o referido refinamento de malha.

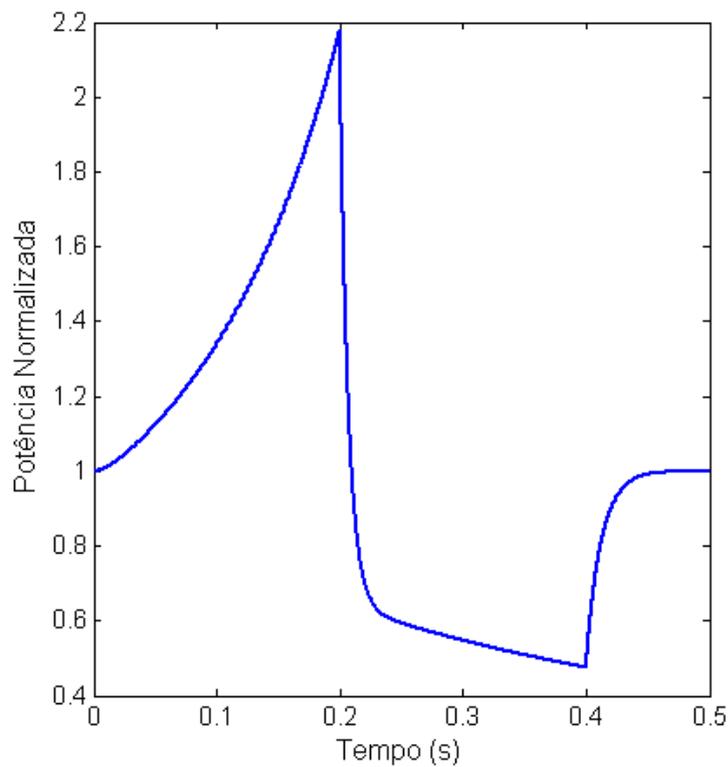


Figura 6.8: Transiente 2: Evolução da Potência – KADS2D. $\Delta t = 10^{-5}$ s

6.2 Simulação de cenários de acidentes em Sistemas ADS

Tendo validado a metodologia do KADS2D, apresentaremos nesta seção alguns resultados obtidos ao se usar o código para simular transientes de condições de acidentes nos sistemas ADS. Especificamente, estamos interessados em mostrar como a potência desses sistemas se comporta quando o acelerador é submetido a uma interrupção do feixe de prótons ou uma excursão temporária na potência deste feixe. Ou seja, iremos analisar os transientes característicos das condições acidentais dos tipos ABI e ABO, abordadas no capítulo 2.

Estas condições foram simuladas para o reator da figura 6.1 substituindo-se a região central pelo alvo de *spallation* [34]. Desta forma, o sistema usado é o representado pela figura 6.9. Os parâmetros nucleares envolvidos constam na tabela 6.4.

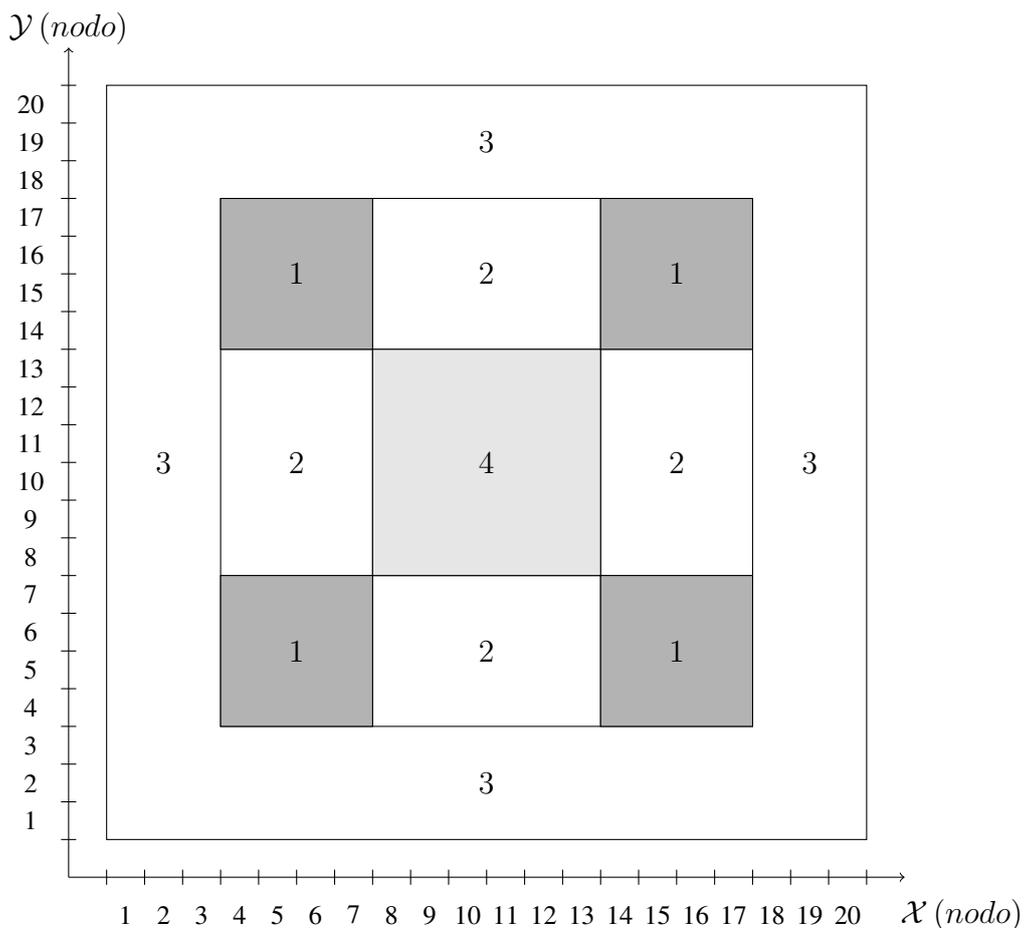


Figura 6.9: Geometria 2D para um Reator tipo ADS ($\Delta x = 8.0cm$, $\Delta y = 8.0cm$: 1 e 2 – Núcleo; 3 – Região do cobertor; 4 – Alvo)

Tabela 6.4: Transientes ABI e ABO: Dados para um Reator tipo ADS (dois grupos de energia e uma família de precursores)

Propriedade	Materiais 1 e 2		Materiais 3 e 4	
	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 1	Grupo 2
D (cm)	1,4	0,4	1,3	0,5
Σ_a (cm^{-1})	0,01	0,15	0,008	0,05
ν	2,1730	2,1730	2,1730	2,1730
Σ_f (cm^{-1})	0,0035	0,1	0,0015	0,03
$\Sigma_s^{g \rightarrow g+1}$ (cm^{-1})	0,01	0,0	0,01	0,0
Velocidade (cm/s)	$1,0 \times 10^7$	$1,0 \times 10^5$	$1,0 \times 10^7$	$1,0 \times 10^5$
Espectro de Fissão	1,0	0,0	1,0	0,0
Constantes dos Precursores	$f_{11} = 1,0$ $\lambda_1 = 0,08$		$f_{21} = 0,0$ $\beta_1 = 0,0064$	
Condições de Contorno	$\phi_1 = 0$ e $\phi_2 = 0$ em $x = 160$ cm e $y = 160$ cm			

6.2.1 Interrupções no feixe de prótons

Os sistemas ADS irão trabalhar com feixes pulsados de prótons. Há, a princípio, três modos de operação para os aceleradores. O primeiro encontra-se em torno de 175 MHz, o segundo em 350 MHz, enquanto que no terceiro modo a frequência do feixe de prótons atinge cerca de 750 MHz. Desta forma, as frequências de operação são tão elevadas que, com boa aproximação, podemos considerar que o feixe de prótons é contínuo. Nesta e na próxima subseção, iremos adotar esta aproximação.

Primeiramente vamos considerar um cenário de interrupção no feixe de prótons. A figura 6.10, na qual foi introduzida uma interrupção de 2 s no feixe, mostra a evolução da potência durante um intervalo de 5 s. Os parâmetros da fonte encontram-se relacionados na tabela 6.5. Conforme pode-se observar, a resposta às variações da fonte são extremamente rápidas, fazendo com que a potência do sistema demore apenas uma fração de segundos para começar a decair de forma a caracterizar o estado subcrítico do reator. Ao se retomar o feixe de prótons, a potência também responde prontamente, executando um salto consideravelmente grande em um intervalo de tempo bastante curto. Porém, o nível de potência é reduzido. Esta redução será tanto maior quanto maior for o intervalo de tempo em que a fonte permanecer desativada e depende, também, de o quão subcrítico é o

sistema. Para retomar a potência nominal de operação mais rapidamente, após um evento ABI, faz-se necessário um aumento da intensidade da fonte externa, o que acarretará na necessidade de um ajuste posterior do feixe de prótons, até que este reassuma o seu valor nominal. Sistemas ADS, conforme citado na subseção 1.1.2, possuem um limiar na razão nêutrons / próton, de maneira que um aumento na frequência de operação pode se tornar inútil ou até reduzir ainda mais a emissão de nêutrons. No escopo do projeto MYHRRA [16], por exemplo, considera-se condição acidental qualquer ABI com duração superior a 3s ou uma sequência de mais de 10 eventos de ABI em um mesmo ciclo de operação, cuja duração é de 250 horas. Evidentemente estes valores de referência podem mudar de projeto para projeto, dependendo da diversidade de regiões mais ou menos sensíveis à fadiga térmica que as interrupções frequentes podem causar.

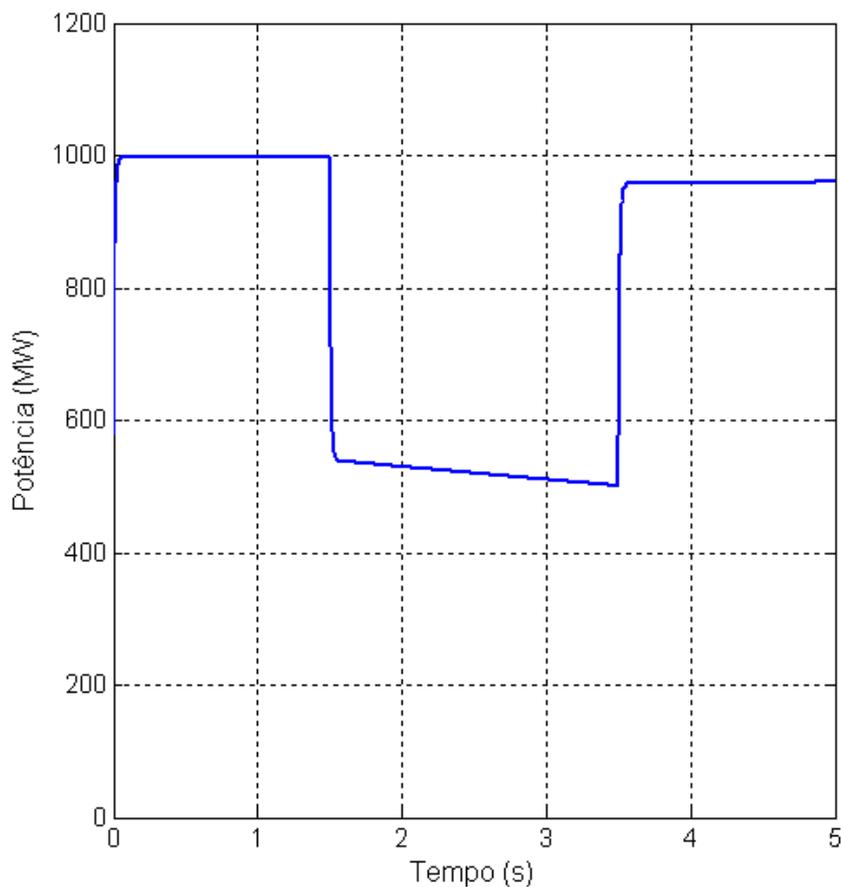


Figura 6.10: ABI de 2s iniciado em $t = 1.5s$

Tabela 6.5: Dados da fonte relativos à figura 6.10. IABI – Instante de início do ABI; DABI – Duração do ABI.

frequência (MHz)	nêutrons/(prótons · cm^3)	IABI (s)	DABI (s)
350,0	0,4	1,5	2,0

Testes numéricos com o KADS2D mostram que o nível de potência se ajusta assintoticamente ao patamar nominal tanto no caso de ocorrência de um evento do tipo ABI, quanto de um evento do tipo ABO, tratado na subseção seguinte. Este intervalo de tempo necessário para alcançar a potência nominal está relacionado ao período requisitado para o restabelecimento do equilíbrio dos nêutrons retardados no sistema.

A figura 6.11 representa exatamente o mesmo caso apresentado na figura 6.10. A única diferença é que agora expandimos a escala de tempo para dois minutos. Conforme podemos observar, de fato, o sistema retoma sua condição nominal conforme justificado anteriormente.

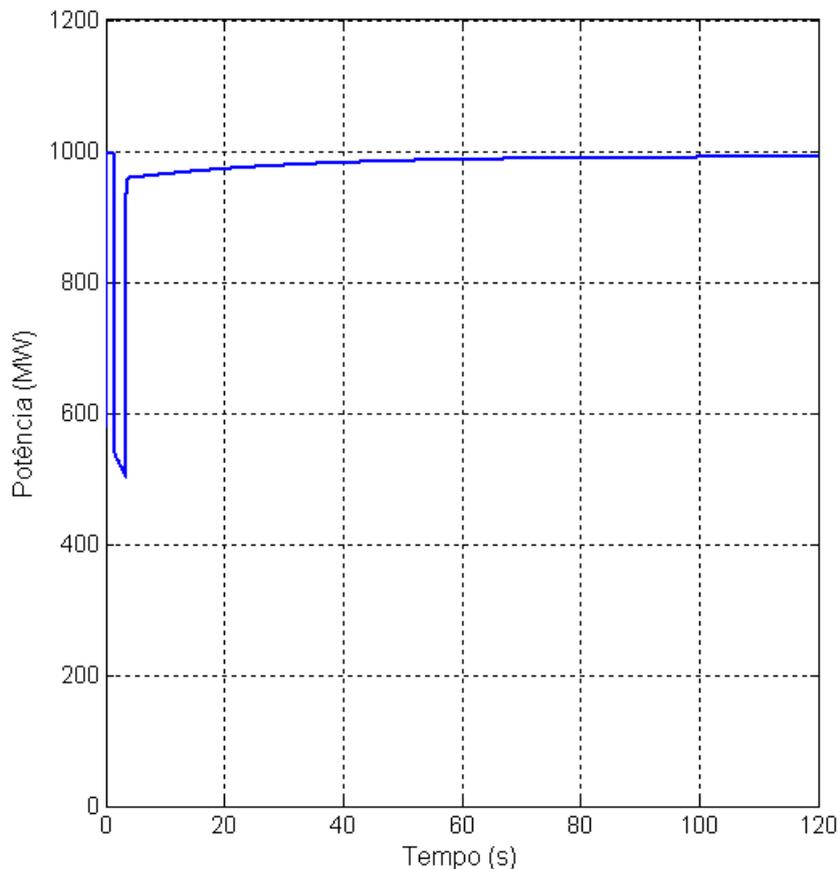


Figura 6.11: ABI de 2s iniciado em $t = 1.5s$

6.2.2 Aumento na intensidade do feixe de prótons

Além das interrupções, tratadas na subseção anterior, uma variação positiva na intensidade do feixe de prótons pode ocorrer inesperadamente e, tanto quando o ABI, esse tipo de condição representa uma situação delicada. O ABO, como é conhecido o evento de aumento não-intencional na intensidade do feixe de prótons, caracteriza uma condição acidental devido à grande sensibilidade do sistema às variações na fonte. Mesmo um pequeno aumento na intensidade do feixe de prótons pode elevar consideravelmente a potência do reator em um intervalo de tempo muito curto. Esta condição, se não controlada a tempo, pode implicar em danos permanentes a componentes tanto do reator quanto do acelerador.

De maneira análoga ao que foi feito na subseção 6.2.1, o KADS2D foi utilizado para simular uma condição ABO a 40% com duração de 2s. As condições nas quais esta situação foi estudada encontram-se listadas na tabela 6.6, enquanto que a figura 6.12 ilustra a variação da potência do reator durante este transiente.

Como o reator é projetado para funcionar em condição estacionária enquanto a fonte externa estiver ativa [35], o aumento acidental na intensidade da fonte faz com que o equilíbrio neutrônico seja deslocado no sentido de fazer com que o reator assuma um comportamento de super criticalidade. Esta condição perdura enquanto o sistema permanecer em estado de *overpower*. Ao findar a excursão de potência, o sistema retorna, analogamente ao caso anterior, para o estado de potência nominal.

A ocorrência sucessiva de eventos do tipo ABO, além dos danos mencionados no capítulo 1, relativos à fadiga térmica e aos riscos de derretimento dos componentes, acelera a queima de combustível, reduzindo o tempo do ciclo de operação. A redução dos ciclos de operação acarreta em maior frequência de manutenção desses sistemas, podendo terminar em inviabilidade econômica e/ou energética da planta.

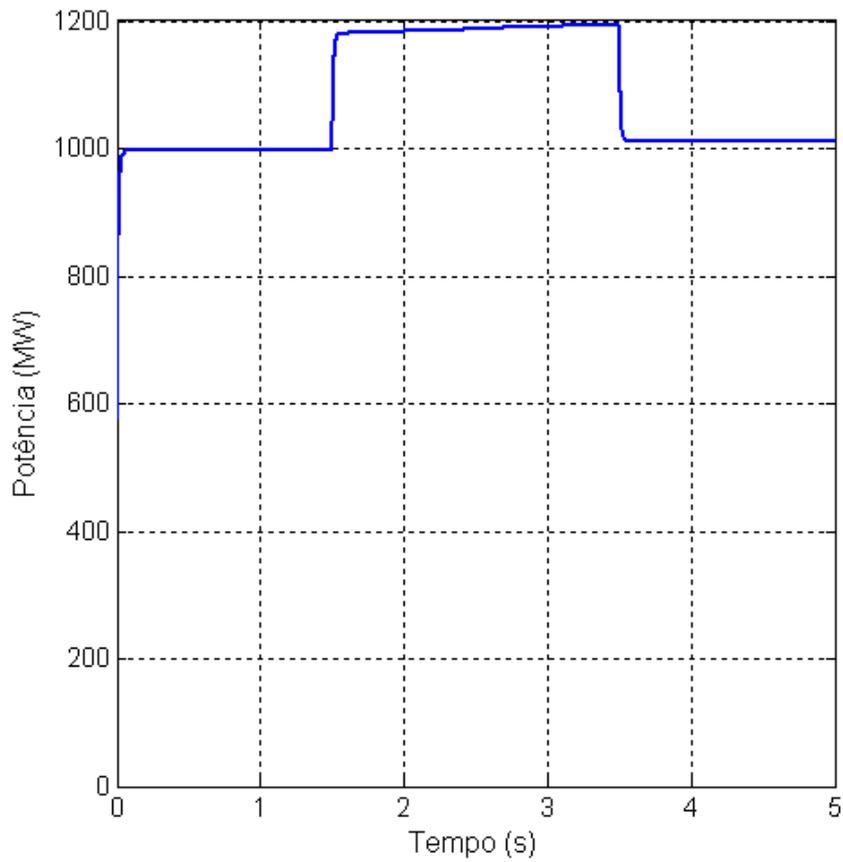


Figura 6.12: ABO de 2s iniciado em $t = 1,5s$

Tabela 6.6: Dados da fonte relativos à figura 6.12. IABO – Instante de início do ABO; DABO – Duração do ABO.

frequência (MHz)	nêutrons/(prótons $\cdot cm^3$)	IABO (s)	DABO (s)
350,0	0,4	1,5	2,0

Na referência [3] podemos encontrar algumas observações acerca do comportamento térmico de sistemas subcríticos acionados por fonte externa.

Capítulo 7

Considerações Finais

O esforço despendido para concluir este trabalho foi devido principalmente à falta de publicações sobre sistemas ADS envolvendo o formalismo da Cinética Espacial. A necessidade do tratamento espacial foi previamente justificada e os resultados encontrados validaram o método usado no KADS2D através de alguns casos particulares da literatura.

O uso do formalismo espacial apresenta muitas vantagens em relação ao tratamento pontual. Dentre os diversos benefícios, podemos citar a dispensa de definições de certos parâmetros como a reatividade, cujo cálculo formal para um sistema subcrítico ainda é um problema em aberto. O uso das diversas e clássicas funções importância também não encontra lugar no escopo da Cinética Espacial.

Com o código desenvolvido neste trabalho, o KADS2D, foi possível fazer algumas previsões sobre o comportamento geral de sistemas subcríticos bidimensionais acionados por uma fonte externa de nêutrons, ao serem submetidos a determinados transientes característicos de condições acidentais. As simulações efetuadas com o KADS2D levaram a importantes observações acerca da evolução destes sistemas, sobretudo do ponto de vista da segurança. Como este código permite a implementação de qualquer quantidade de grupos de energia e também pode considerar qualquer número de famílias de precursores, ele pode ser considerado de aplicação geral, tendo como principal limitação a necessidade do uso de geometria retangular.

Há indícios de que o uso de mais de um acelerador de partículas para alimentar o reator, nos sistemas ADS, pode proporcionar uma considerável redução dos efeitos maléficos das flutuações na intensidade do feixe de prótons. Tendo isto em vista, esperamos dar continuidade a este trabalho ao incluir, no KADS2D, a possibilidade de implementar múltiplas fontes externas simultaneamente e generalizar este código para sistemas tridimensionais. Uma outra possibilidade seria modificar o código para que ele possa ganhar aplicabilidade em sistemas de geometria hexagonal. Desta forma, esperamos conseguir representações mais realistas dos sistemas ADS.

Referências Bibliográficas

- [1] OECD Nuclear Energy Agency. *Accelerator-driven Systems (ADS) and Fast Reactors (FR) in Advanced Nuclear Fuel Cycles: A Comparative Study*. Relatório Técnico. Paris, 2002
- [2] Sara T. Mongelli, José R. Maiorino, S. Anéfalos, Airton Deppman, Thiago Carlucio, 2005. “Spallation Physics and the Target Design”, *Brazilian Journal of Physics*, v. 35, n. 3B (Set), pp. 894-897
- [3] Ali Ahmad, Benjamin A. Lindley, Geoffrey T. Parks, 2012. “Accelerator-induced transients in Accelerator Driven Subcritical Reactors”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Reserch A*, v. 696 (Sept), pp. 55-65
- [4] Motomu Suzuki, Tomohiro Iwasaki, Takanori Sugawaraa, 2006. “A study of startup and shutdown procedure of Accelerator-Driven System”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, v. A, n. 562 (Mar), pp. 867-869
- [5] SUESCÚN, D., 2007, *Métodos para o Cálculo da Reatividade usando derivadas da Potência nuclear e o filtro FIR*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- [6] Hesham Shahbunder, Cheol Ho Pyeon, Tsuyoshi Misawa, Jae-Yong Lim, Seiji Shiroya, 2010. “Subcritical multiplication factor and source efficiency in accelerator-driven system”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 37 (May), pp. 1214-1222

- [7] Pratibha A. Gokhale, Sangeeta Deokattey, Vijai Kumar, 2006. “Accelerator driven systems (ADS) for energy production and waste transmutation: International trends in R&D”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 48, pp. 91-102
- [8] H. Nifenecker, S. David, J.M Loiseaux, O. Meplan, 2001. “Basics of accelerator driven subcritical reactors”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, v. 463, pp. 428-467
- [9] Toshinobu Sasa, Hiroyuki Oigawa, Kazufumi Tsujimoto, Kenji Nishihara, Kenji Kikuchi, Yuji Kurata, Shigesu Saito, Masatoshi Futakawa, Makoto Umeno, Nobuo Ouchi, Yasuo Arai, Kazuo Minato, Hideki Takano, 2004. “Research and development on accelerator-driven transmutation system at JAERI”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 230, pp. 209-222
- [10] Graiciany P. Barros, Claubia Pereira, Maria A. F. Veloso, Antonella L. Costa, Patrícia A. L. Reis, 2010. “Neutron Production Evaluation from a ADS Target Utilizing the MCNPX 2.6.0 code”, *Brazilian Journal of Physics*, v. 40, n. 4 (Dec), pp. 414-418
- [11] ERIKSSON, M., 2005 *Accelerator-driven Systems: Safety and Kinetics*. Doctoral Thesis. Department of Nuclear and Reactor Physics, Royal Institute of Technology, Stockholm.
- [12] P. Seltborg, J. Wallenius, K. Tucek, W. Gudowski, 2003. “Definition and application of proton source efficiency in accelerator driven systems”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 145, n. 3, pp. 390-399
- [13] W. Maschek, X. Chen, F. Delage, A. Fernandez-Carretero, D. Hass, C. Matzerath Boccaccini, A. Rineiski, P. Smith, V. Sobolev, R. Thetford, J. Wallenius, 2008. “Accelerator driven systems for transmutation: Fuel development, design and safety”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 50, pp. 333-340
- [14] Pramod Kumar Nema, 2011. “Application of Accelerators for Nuclear Systems: Accelerator Driven Systems (ADS)”, *Energy Procedia*, v. 7, pp. 597-608

- [15] OECD Nuclear Energy Agency. *Physics and Safety of Transmutation Systems: A Status Report*. Relatório Técnico. Paris, 2006
- [16] H. Ait Abderrahim, P. Kupschus, E. Malambu, Ph. Benoit. K. Van Tichelen, B. Arien, F. Vemeersch, P. D'hondt, Y. Jongen, S. Ternier, D. Vandeplassche, 2001. "MYRRHA: A multipurpose accelerator driven system for research & development", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, v. A, n. 463, pp. 487-494
- [17] J.L Biarrote, A.C Mueller, H. Klein, P. Pierini, D. Vandeplassche, 2010. *Accelerator reference design for MYRRHA European ADS demonstrator*. In: Proceedings of Linear Accelerator Conference LINAC2010. Tsukuba, Japan
- [18] A. Gandini, M. Salvatores, I. Slessarev., 2000. "Balance of power in ADS operation and safety", *Annals of Nuclear Energy*, v. 27, pp. 71-84
- [19] A. Rineiski, W. Maschek, 2005. "Kinetics models for safety studies of accelerator driven systems", *Annals of Nuclear Energy*, v. 32, pp. 1348-1365
- [20] J. Wright, I. Pázsit., 2006. "Neutron kinetics in subcritical cores with application to the source modulation method", *Annal of Nuclear Energy*, v. 33, pp. 149-158
- [21] Carl-Magnus Persson, Andrei Fokau, Ivan Serafimovich, Victor Bournos, Yurii Fokov, Christina Routkovskaia, Hanna Kiyavitskaya, Waclaw Gudowski., 2008. "Pulsed neutron source measurements in the subcritical ADS experiment YALINA-Booster", *Annals of Nuclear Energy*, v. 35, pp. 2357-2364
- [22] M. Eriksson, J. Wallenius, M. Jolkkonen, J.E. Cahalan, 2005. "Inherent Safety of Fuels for Accelerator-Driven Systems", *Nuclear Technology*, (Jan)
- [23] M. Eriksson, J. Wallenius, J. E. Cahalan, K. Tucek, W. Gudowski, 2002. *Safety Analysis of Na and Pb-Bi Coolants in Response to Beam Instabilities*. In: Third International Workshop on Utilisation and Reliability of High Power Proton Accelerators. Santa Fe, New Mexico, USA

- [24] ALVIM, A.C.M., 1976 *Finite Diference Techniques For Solving Multidimensional Kinetics*. Doctoral Thesis. Department of Nuclear Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts.
- [25] STACEY, WESTON M., 2007, *Nuclear Reactor Physics*. 2 ed. Atlanta, Wiley VCH-Verlag
- [26] Ferguson, D.R, Hansen, K.F, 1973. “Solution of the Space-Dependent Reactor Kinetics Equations in Three Dimensions”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 51, pp. 189-205
- [27] Verdú, G., Ginestar, D., Vidal, V., Muñoz-Cobo, J.L, 1995. “A Consistent Multidimensional Nodal Method for Transient Calculations”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 22, n. 6, pp. 395-410
- [28] Bjarne A. Jensen, 2012. *Thesis on applications of the Alternating Direction Implicit Method*. In: Copenhagen Business School. Copenhagen, Dinamarca.
- [29] Aboanber, A.E., Nahla, A.A., 2007. “Adaptative matrix formation (AMF) method of space-time multigroup reactor kinetics equations in multidimensional model”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 34, pp. 103-119
- [30] Ginestar, D., Marín, J., Verdú, G., 2001. “Multilevel methods to solve the neutron diffusion equation”, *Applied Mathematical Modelling*, v. 25, pp. 463-477
- [31] Capilla, M., Talavera, C.F., Ginestar, Verdú, G., 2009. “A nodal collocation approximation for the multidimensional PL equations. 3D applications”, *XXI Congreso de Ecuaciones Diferenciales Y Aplicaciones – XI Congreso de Matemática Aplicada*, Ciudad Real, pp. 1-8
- [32] Capilla, M.T., Talavera, C.F., Ginestar, Verdú, G., 2012. “Application of a nodal collocation approximation for the multidimensional PL equations to the 3D Takeda benchmark problems”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 40, pp. 1-13

- [33] de LIMA, Z.R., 2005, *Aplicação do Método dos Pseudo-Harmônicos à Cinética Multidimensional*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- [34] Zafar Yasin, Muhammad Ikram Shahzad, 2010. “From conventional nuclear power reactors to accelerator-driven systems”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 37, pp. 87-92
- [35] V. Bécares, D. Villamarín, M. Fernández-Ordóñez, E.M. González-Romero, C. Berglöf, V. Bournos, Y. Fokov, S. Mazanik, I. Serafimovich., 2013. “Validation of ADS reactivity monitoring techniques in the Yalina-Booster subcritical assembly”, *Annal of Nuclear Energy*, v. 53, pp. 331-341