INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**Acoplamento entre os métodos diferencial e da teoria da
perturbação
para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade em
problemas de transmutação
nuclear**

Lubianka Ferrari Russo Rossi

**Tese apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do
Grau de Doutor em Ciências na
Área de Tecnologia Nuclear -
Reatores**

Orientador:
Prof. Dr. **Adimir dos Santos**

Versão Corrigida
Versão Original disponível no IPEN

**São Paulo
2014**

Lubianka Ferrari Russo Rossi

TESE APRESENTADA
AO
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
PARA
OBTENÇÃO DO TÍTULO
DE
DOUTOR EM CIÊNCIAS

Programa: Tecnologia Nuclear-Reatores

Orientador: Prof. Dr. Adimir dos Santos

Durante o desenvolvimento deste trabalho o autor recebeu auxílio financeiro da CNEN

São Paulo, novembro de 2014

Agradecimentos

Agradeço ao IPEN e a pós-graduação que graças ao trabalho ímpar contribuíram de maneira direta com este trabalho.

Agradeço ao meu orientador por compartilhar comigo uma pequena parte do seu conhecimento.

Agradeço ao meu pai João Luis Ferrari por ter me dado educação e me ensinado que não existe um caminho sem honestidade.

Agradeço a minha sogra por me auxiliar nos cuidados com os meus filhos, pois sem a ajuda dela o fim deste trabalho não seria possível.

Agradeço ao colega Thiago Garcia João por revisar o inglês.

Agradeço ao meu esposo pelas discussões que em muito contribuíram com este trabalho.

Agradeço a comissão julgadora, mas em especial ao Dr. Antônio Teixeira pelas correções do português e ao Dr. José Rubens Maiorino pelas sugestões que em muito contribuíram para este trabalho.

E agradeço a Deus e Nossa Senhora de Fátima pela força e inspirações que me foram dadas durante este trabalho.

Resumo

Rossi, L. F. R. **Acoplamento entre os métodos diferencial e da teoria da perturbação para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade em problemas de transmutação nuclear**. 2014. 184 f. Tese (Doutorado) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

Este trabalho apresenta um novo método para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade, através da união do método diferencial e da teoria da perturbação generalizada, que são os dois métodos tradicionalmente utilizados em física de reatores para a obtenção de tais grandezas. Esses dois métodos apresentam algumas deficiências tornando os cálculos dos coeficientes de sensibilidade lentos ou computacionalmente exaustivos, mas unindo-os é possível eliminar as deficiências apresentadas por ambos e obter uma nova equação para o coeficiente de sensibilidade. O método proposto neste trabalho foi aplicado em um reator do tipo PWR, onde foi feita análise de sensibilidade da produção e da razão de conversão do ^{239}Pu , para um ciclo de 120 dias de queima. O código utilizado para a análise de queima e análise de sensibilidade, o CINEW, foi desenvolvido durante este trabalho e os resultados obtidos foram comparados com os códigos amplamente utilizados em física de reatores, como o CINDER e o SERPENT. As conclusões obtidas foram que o novo método matemático para a obtenção dos coeficientes de sensibilidade e o CINEW, além de fornecer agilidade numérica também apresentam eficiência e segurança. Pois o

novo método matemático para a obtenção dos coeficientes quando comparados com os métodos tradicionais utilizados para a análise de sensibilidade, mostram resultados satisfatórios, mesmo quando o método utiliza aproximações matemáticas que diferem do método proposto, e com a vantagem de não apresentar as deficiências apresentadas pelos métodos diferencial e da teoria da perturbação generalizada. As análises de queima obtidas pelo CINEW foram comparadas com o CINDER, que mostraram uma diferença aceitável, apesar do CINDER apresentar alguns problemas computacionais que advém da época em que foi feito. A originalidade deste trabalho é a aplicação do método proposto em problemas que envolvem dependência temporal e a elaboração do primeiro código nacional que faz análise de queima e análise de sensibilidade.

Palavras-chave: análise de sensibilidade, coeficientes de sensibilidade, física de reatores.

Abstract

ROSSI, L. F.R. **Coupling between the differential and perturbation theory methods for calculating sensitivity coefficients in nuclear transmutation problems**. 2014. 184 f. Tese (Doutorado) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

The main target of this study is to introduce a new method for calculating the coefficients of sensibility through the union of differential method and generalized perturbation theory, which are the two methods generally used in reactor physics to obtain such variables. These two methods, separated, have some issues turning the sensibility coefficients calculation slower or computationally exhaustive. However, putting them together, it's possible to repair these issues and build a new equation for the coefficient of sensibility. The method introduced in this study was applied in a PWR reactor, where it was performed the sensibility analysis for the production and ^{239}Pu conversion rate during 120 days (1 cycle) of burnup. The computational code used for both burnup and sensibility analysis, the CINEW, was developed in this study and all the results were compared with codes widely used in reactor physics, such as CINDER and SERPENT. The new mathematical method for calculating the sensibility coefficients and the code CINEW provide good numerical agility and also good efficiency and security, once the new method, when compared with traditional ones, provide satisfactory results, even when the other methods use different mathematical approaches. The burnup analysis, performed using the code CI-

NEW, was compared with the code CINDER, showing an acceptable variation, though CINDER presents some computational issues due to the period it was built. The originality of this study is the application of such method in problems involving temporal dependence and, not least, the elaboration of the first national code for burnup and sensitivity analysis.

Keywords: sensibility analysis, sensitivity coefficients, reactor physics.

Sumário

Lista de Abreviaturas	xiii
Lista de Símbolos	xv
Lista de Figuras	xvii
Lista de Tabelas	xxi
1 Introdução	1
1.1 Objetivos	3
1.2 Notas históricas	5
2 Análise de transmutação	9
2.1 Equação de transmutação e Equação de transporte de nêutrons	12
2.2 Aproximação Quase Estática	16
2.3 Solução da Equação de Transmutação	19
2.4 Equação de Decaimento Adjunta	22
3 Análise de sensibilidade	25
3.1 Método Diferencial	26
3.2 Método da Teoria da Perturbação Generalizada	30
3.3 Equações adjuntas de queima para o caso quase-estático	34
3.4 Método Proposto	36

4	Aplicações para o método proposto	41
4.1	Igualdade entre os métodos	42
4.2	Estudo de Casos	52
4.3	Aplicação do método proposto em um Reator Hipotético	62
5	Aplicação do Método Proposto em Reatores de Potência	69
5.1	Especificações do Combustível	70
5.2	Produção de ^{239}Pu	72
5.3	Sensibilidade da produção do ^{239}Pu em relação aos núclídeos de interesse	82
5.4	Sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U	96
6	Conclusões	105
A	Notação matemática usada neste trabalho	107
A.1	Notação Vetorial	107
A.2	Produtos internos de vetores e funções	107
A.3	Derivada de vetores	108
A.4	Derivada de um funcional	108
A.5	Variação funcional	108
A.6	Funcional da série de Taylor	109
B	Métodos de Resolução da Equação de Decaimento	111
B.1	Transformada de Laplace	111
B.2	Transformada Inversa de Laplace	114
B.3	Resolução da Equação de Decaimento através da Transformada de Laplace	115
B.3.1	Matriz Exponencial	117
C	Propriedades da Teoria Adjunta	119

D Equações Adjuntas de Queima	123
E CINEW (New Code for Depletion and Sensibility Analysis)	131
F Entrada de dados usados para o MCNP	137
G Entrada de dados usados para o SERPENT	147
Referências Bibliográficas	155
Índice Remissivo	161

Lista de Abreviaturas

CINEW	A New Code for Depletion and Sensibility Analysys
CNAAA	Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto
IPEN	Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares
LMFBER	Liquid Metal Fast Breeder Experimental Reactor
PWR	Pressurized Water Reactor
TGP	Generalized Perturbation Theory

Lista de Símbolos

Φ	Fluxo de nêutrons
β	yield de fissão
α	branching ratio
α_k	dado nuclear
ν	número de nêutrons por fissão
Λ	constante de decaimento
σ	seção de choque microscópica

Lista de Figuras

4.1	Concentrações direta e adjunta para o ^{238}U	66
4.2	Concentrações adjuntas para o ^{239}Pu	67
4.3	Sensibilidade da produção do ^{239}Pu em relação a seção de choque de absorção do ^{238}U no grupo 1.	67
4.4	Sensibilidade da produção do ^{239}Pu em relação a seção de choque de captura do ^{238}U no grupo 1.	68
5.1	Diagrama esquemático do elemento combustível de Angra 1. . .	71
5.2	Cadeia de produção do ^{239}Pu	72
5.3	Concentrações diretas e adjuntas do ^{235}U	76
5.4	Concentrações diretas e adjuntas do ^{237}U	76
5.5	Concentrações diretas e adjuntas para o ^{238}U	77
5.6	Concentrações diretas e adjuntas para o ^{239}U	77
5.7	Concentrações diretas e adjuntas para o ^{239}Np	78
5.8	Concentrações diretas e adjuntas para o ^{239}Pu	78
5.9	Concentrações para o ^{235}U calculadas pelo CINDER e pelo CINEW. .	80
5.10	Concentrações para o ^{238}U calculadas pelo CINDER e pelo CINEW. .	80
5.11	Concentrações para o ^{239}Pu calculadas pelo CINDER e pelo CI- NEW.	81
5.12	Coefficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 1.	83

5.13	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 2.	84
5.14	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 3.	84
5.15	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 4.	85
5.16	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 1.	86
5.17	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 2.	87
5.18	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 3.	87
5.19	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 4.	88
5.20	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 1.	89
5.21	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 2.	89
5.22	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 3.	90
5.23	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 4.	90
5.24	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Np no grupo 3.	91
5.25	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 1.	92
5.26	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 2.	93

5.27	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 3.	93
5.28	Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 4.	94
5.29	Comparação entre o método direto e o método proposto.	95
5.30	Erro relativo entre o método direto e o método proposto para a produção de ^{239}Pu	95
5.31	Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 1.	97
5.32	Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 2.	97
5.33	Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 3.	98
5.34	Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 4.	99
5.35	Comparação da razão de conversão obtida pelo SERPENT e pelo CINEW.	100
5.36	Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 1.	101
5.37	Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 2.	102
5.38	Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 3.	102
5.39	Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 4.	103
B.1	Contorno dos pólos da equação.	114

Lista de Tabelas

4.1	Valores hipotéticos para os dados do exemplo 2.	59
4.2	Resultados para os cálculos do exemplo 2 usando a teoria da perturbação.	59
4.3	Resultados dos cálculos do exemplo 2 para o método adjunto. .	60
4.4	Resultados dos métodos usados dois grupos de energia.	62
4.5	Seções de choque para o ^{235}U	63
4.6	Seções de choque para o ^{238}U	63
4.7	Seções de choque para o ^{239}Pu	63
5.1	Dados da vareta do combustível da usina Angra de 1.	70
5.2	Dados da Guia de controle da usina Angra 1.	70
5.3	Dados do elemento combustível da usina Angra 1.	71
5.4	Dados do Urânio.	71
5.5	Seções de choque para o ^{235}U	72
5.6	Seções de choque para o ^{238}U	73
5.7	Seções de choque para o ^{239}U	73
5.8	Seções de choque para o ^{238}Pu	74
5.9	Seções de choque para o ^{239}Pu	74
5.10	Valores obtidos pelo CINDER e pelo CINEW para o ^{235}U . . .	81
5.11	Valores obtidos pelo CINDER e pelo CINEW para o ^{238}U . . .	82
5.12	Valores obtidos pelo CINDER e pelo CINEW para o ^{239}Pu . . .	82

5.13	Valores obtidos para a razão de conversão pelo SERPENT e pelo CINEW.	99
5.14	Incertezas colapsadas em 4 grupos de energia.	101

Capítulo 1

Introdução

Desde os seus primórdios, o desenvolvimento dos estudos em física de reatores contribuíram, de maneira bastante expressiva, para o desenvolvimento da área da computação devido a necessidade de técnicas computacionais para cálculos específicos. Isto levou, conseqüentemente, ao desenvolvimento dos métodos matemáticos utilizados nesta área. Seguido pelo advento dos computadores modernos, a matemática usada em física de reatores amadureceu, atingindo um ponto em que começaram a surgir incertezas, que na época acreditava-se que residissem no dado nuclear básico. Era necessário, então, uma teoria que fosse capaz de analisar e estudar tais erros. Nasceu, então, há mais de cinquenta anos, a área de análise de sensibilidade que através dos coeficientes de sensibilidade, estabelece uma ligação entre as incertezas relacionadas com os dados nucleares e as grandezas que serão investigadas.

Os coeficientes de sensibilidade são definidos como a razão entre a variação percentual do parâmetro integral pela variação percentual do dado nuclear básico. Os parâmetros integrais são grandezas estudadas durante toda a vida de um reator nuclear, entre eles, a densidade de núclídeos, "yield" de fissão, taxa de conversão e regeneração, entre outros, e o dado nuclear básico pode ser definido como a grandeza conhecida do problema a ser estudado tais como seções de choque.

A aplicação dos coeficientes de sensibilidade são de grande importância em física de reatores, pois além de estimar as incertezas que possam vir a ocorrer em determinadas situações, essas grandezas medem também a importância de um dado nuclear particular tais como, seção de choque, constante de decaimento, etc, para uma dada resposta (parâmetro integral) no reator.

O projeto de uma reator nuclear requer um grande número de dados nucleares, para que possa ser feita uma lista dos dados mais importantes, os coeficientes podem servir de guia para a escolha dos dados mais importantes e ao mesmo tempo apresenta as estimativas das incertezas intrínsecas.

O conhecimento das incertezas envolvidas são de grande importância quando se trata de viabilidade, segurança e economia de combustíveis de reatores nucleares. Através das medidas de incertezas, é possível decidir qual dado nuclear pode ser melhorado afim de obter o melhor resultado em relação aos parâmetros integrais e dado nuclear básico. Por exemplo, se forem observadas discrepâncias de um dado experimento, é possível através de análises de sensibilidades e incertezas envolvidas, decidir se essas são inerentes aos dados do problemas ou se acontecem devido a erros de detectores.

Existem vários métodos matemáticos para a determinação dos coeficientes de sensibilidade [1]. Em física de reatores os dois métodos tradicionalmente usados são: o método diferencial e o método da teoria da perturbação generalizada. No método diferencial o dado nuclear é diferenciado diretamente em relação as equações que regem o problema, ou seja, as equações de transporte e transmutação. Na teoria da perturbação generalizada, os coeficientes de sensibilidade são calculados através das equações de transporte e transmutação, utilizando um processo de linearização juntamente com a utilização das funções adjuntas dessas equações.

Ambos os métodos, apesar de apresentarem vantagens, também apresentam algumas desvantagens. O método diferencial independe do parâmetro integral,

sendo que as derivativas funcionais do fluxo e da densidade de núclídeos podem ser utilizadas para qualquer tipo de parâmetro integral, mas possui a desvantagem de ser dependente do dado nuclear básico, as derivativas do fluxo de nêutrons e densidade de núclídeos em relação ao dado nuclear básico têm que ser obtidas para cada tipo de dado nuclear básico. O método da teoria da perturbação generalizada possui a vantagem de independe do dado nuclear básico, mas depende do parâmetro integral, então as equações adjuntas têm que ser resolvidas para cada parâmetro integral.

1.1 Objetivos

Os dois métodos utilizados para a análise de sensibilidade apresentam os mesmos resultados [2] para os coeficientes de sensibilidade, mas possuem uma certa dificuldade computacional inerente aos métodos o que pode tornar os cálculos lentos mesmo com o advento de computadores modernos. Portanto, é necessário um método que resolva ambas as dificuldades dos dois modelos, tornando os cálculos dos coeficientes de sensibilidade mais eficientes e sem as dependências do parâmetro integral e do dado nuclear básico.

O objetivo deste trabalho consiste em, através da união da teoria da perturbação generalizada e do método diferencial, apresentar uma nova equação para a obtenção dos coeficientes de sensibilidade sem as deficiências apresentadas por ambos, e além disso, propor uma equação que torne os cálculos ágeis e eficientes.

A originalidade deste trabalho está em propor uma nova equação para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade em problemas que envolvam variações temporais, e o código CINEW que faz análise de queima e análise de sensibilidade simultaneamente.

As análises de queima feitas pelo CINEW foram desenvolvidas baseadas no

código CINDER. Como o CINDER, o CINEW faz análises de queima de maneira completa, abrangendo 32 cadeias principais e 103 secundárias, e ademais calcula as concentrações adjuntas. Para análise de sensibilidade o CINEW utiliza a equação que será proposta neste trabalho para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade.

No capítulo II será apresentado uma revisão das equações que descrevem o comportamento dinâmico de um reator nuclear.

No capítulo III será apresentado a teoria de análise de sensibilidade, suas principais características e os métodos tradicionalmente usados em física de reatores precedido pelo método matemático proposto por este trabalho.

No capítulo IV serão exemplificados algumas aplicações para os três métodos citados no capítulo III. Os exemplos escolhidos possuem um grau de complexidade simples, o que permite uma análise analítica ou semi-analítica bastante lógica e precisa.

No capítulo V o método proposto será aplicado em um reator de potência do tipo PWR, moderado e refrigerado a água leve, este reator é um reator térmico e o objetivo da sua utilização é a geração de energia, sendo semelhante ao reator utilizado por Angra I. Reatores deste tipo têm sido o reator mais comissionado em todo o mundo, uma vez que necessitam de menos material físsil do que os outros dois tipos de reatores, os reatores rápidos e intermediários.

O capítulo VI, mostra as conclusões deste trabalho juntamente com a extensão futura dos trabalhos a serem desenvolvidos a partir do método aqui proposto. E finalmente serão apresentados os apêndices, onde os quatro primeiros irão contribuir para o entendimento de algumas exposições matemáticas feitas durante este trabalho e os demais tratam-se dos inputs utilizados neste trabalho e do método matemático utilizado pelo CINEW.

Na próxima secção será apresentado uma revisão bibliográfica de análise de sensibilidade.

1.2 Notas históricas

Os estudos de análise de sensibilidade desde o seu início no fim da década de 1950 e até hoje têm apresentado grandes desenvolvimentos e desafios, tanto em problemas simples que não envolvam a dependência temporal, quanto em problemas que exigem um maior grau de complexidade, como os problemas que envolvem dependência temporal.

A teoria da perturbação, desenvolvida em mecânica quântica [3], foi de grande importância no início dos estudos de física de reatores, sendo inicialmente proposta por Wigner [4], em 1945, para o estudo de quantidades fundamentais como a inserção de reatividade de diferentes materiais no centro do reator. Esta formulação ainda hoje é largamente usada por analistas de reatores, fazendo uso consistente do conceito de fluxo adjunto.

No início de 1960 a teoria de análise de sensibilidade foi usada em experimentos de análise de criticalidade. Isto na época representou um grande avanço, pois tornou possível calcular informações de parâmetros físicos que são fortemente influenciados pelos dados de seção de choque e, conseqüentemente, identificar quais seções de choque seriam mais importantes para um dado problema no reator.

Foi nesta década que Usachev [5] desenvolveu a teoria da perturbação generalizada para estudar o efeito de uma pequena perturbação na taxa de funcionais lineares, especificamente na taxa de regeneração de reatores. Três anos depois, Gandini [6] estendeu essa teoria para taxas funcionais (funcionais adjuntos lineares e bilineares em sistemas críticos) e Stacey [7] usando técnicas variacionais desenvolveu a teoria da perturbação generalizada para taxas funcionais de fluxos lineares, funcionais adjuntos lineares e funcionais bilineares. Diferente de Usachev e Gandini, Stacey não preservou a criticalidade.

No fim da década de 1970, Greenspan [8] contribuiu com uma terceira versão

da teoria de perturbação generalizada em que se utiliza técnicas de perturbação convencional combinada com a diferença do fluxo e método da diferença adjunta. Independentemente da aproximação usada para derivar a teoria da perturbação generalizada, todas essas aproximações apresentam os mesmos resultados.

A extensão da teoria da perturbação generalizada em problemas de transmutação não é simples, considerando que a dinâmica do reator nuclear é governada pelas equações de transmutação e transporte que são descritas por um sistema de equações não lineares acopladas, cujas as técnicas de resolução podem ser encontradas em [9, 10, 11].

Também, no fim da década de 1970, Oblov [2] obteve os coeficientes de sensibilidade através da diferenciação direta da equação de Boltzmann com relação ao dado nuclear básico, produzindo os mesmos resultados obtidos através de teoria da perturbação generalizada. Estas aproximações consideraram problemas que não envolviam dependência temporal e foram aplicadas em uma variedade de problemas [12, 13, 14, 15, 16, 17].

Para problemas que envolvam dependência temporal é necessário considerar dois formalismos: o formalismo acoplado e o desacoplado [18]. No formalismo desacoplado, é assumido que a concentração do nuclídeo e o fluxo de nêutrons são independentes, ou seja, a densidade de nuclídeos na equação de transporte e o fluxo de nêutrons na equação de transmutação são interpretadas como entradas ou parâmetros nestas equações. No formalismo acoplado, essas duas grandezas são resolvidas diretamente na equação de transporte de Boltzmann e na equação de transmutação a não linearidade entre estas duas grandezas, é completamente preservada.

Gandini [19] usou a teoria da perturbação generalizada dependente do tempo para a análise de problemas de transmutação usando o formalismo desacoplado e usando uma hipótese adicional (uma equação de campo de nuclídeos

específico). Uma aplicação para o problema de produção de actínídeos em um reator rápido regenerador de metal líquido foi relatada por Tondinelly [20] e Gandini [6].

Williams [21] usando uma equação similar, analisou o problema da produção de plutônio em um reator térmico, com ênfase em análise de incertezas e posteriormente Kallfelz [22], apresentou uma extensão destes métodos incluindo fenômenos não lineares, usando a teoria da perturbação generalizada, ele calculou a influência da mudança no fluxo de nêutrons devida a mudança da densidade de nuclídeos, na produção de isótopos de plutônio em um LMFBER ("Liquid Metal Fast Breeder Experimental Reactor").

Estas análises foram somente parciais uma vez que a mudanças na densidade de nuclídeos surgem a partir de mudanças no fluxo de nêutrons e essas não foram consideradas. Quando comparados com cálculos diretos, estes métodos resultam em uma precisão satisfatória para estes problemas, mas possuem a desvantagem de precisar de uma teoria generalizada separada para cada seção de choque na equação de transmutação [23].

Harris e Becker [24], usando o formalismo acoplado, desenvolveram a teoria da perturbação generalizada dependente do tempo para satisfazer completamente o acoplamento entre a densidade de nuclídeos e o fluxo de nêutrons. Eles consideraram o problema específico da sensibilidade do custo do ciclo combustível para os dados nucleares. Embora o formalismo usado fora apresentado de uma maneira muito breve e acompanhada de uma notação formal de operadores, eles consideraram somente problemas simples de transmutação.

Williams[18], usando o formalismo acoplado, desenvolveu uma metodologia consistente com os métodos existentes para tratamento de dependência temporal do fluxo de nêutrons e do campo de nuclídeos. Ele usou uma técnica variacional aproximada para derivar a teoria da perturbação generalizada para transmutações no modelo quase-estático, e analisou o efeito no inventário final

de ^{235}U e ^{239}Pu devido a mudanças de concentração de vários núclídeos no começo da vida de um reator rápido regenerador, e comparou seus resultados com cálculos diretos, os quais mostraram excelentes concordâncias.

Greenspan [25], usando um procedimento similar ao de Becker, desenvolveu a teoria da perturbação generalizada dependente do tempo para problemas de acoplamento nêutrons-núclídeos, considerando situações em que os nêutrons atrasados são importantes. Diferente de Becker, que usou a notação de operadores, Greenspan fez uso explícito das equações de transporte de nêutrons, a transmutação de núclídeos e que na prática apresentam resultados mais diretos do que aqueles usados por Becker.

Palmiotti [26], usando técnicas de análise de sensibilidade dependente do tempo, para aplicações usuais em reatores, apresentou um trabalho onde calculou o impacto das incertezas e estimou a precisão nas avaliações da radiotoxicidade. Sua metodologia é aplicada para diferentes modos de controle de dissipação radioativa, está associada ao European Fast Reactors [27] juntamente com os estudos de ciclo de combustíveis de reatores rápidos cujos resultados são fornecidos em termos de coeficientes de sensibilidade dos dados básicos.

Dois anos depois S. Das [28], usando o método de cinética pontual em conjunto com o espectro de nêutrons atrasados e fator beta de Growth [29, 30], obteve a sensibilidade do comportamento dinâmico de um reator rápido regenerador com grandes variações nos precursores de nêutrons atrasados aplicados no estudo de acidentes de reatividade.

Recentemente, técnicas de análise de sensibilidade e cálculo de incertezas foram reformuladas e aplicadas para sistemas nucleares que envolvem análises completas [26, 31] e acopladas com simulações mais complexas de Monte Carlo [32, 33, 34, 35].

Capítulo 2

Análise de transmutação

A análise de transmutação em um reator nuclear tem início quando o seu combustível é exposto a um fluxo de nêutrons durante um intervalo de tempo. Isto provoca várias reações nucleares no combustível do reator e, como consequência, a formação de vários núclídeos. As mudanças decorrentes das transmutações nucleares ocasionam mudanças no comportamento e na operação do reator nuclear, sendo a previsão destas mudanças de grande importância para uma variedade de características operacionais que vão desde a segurança até economia do combustível durante toda a vida do reator nuclear.

Analisar um reator sob o ponto de vista dinâmico engloba as variações temporais, ou seja, processos de transmutações. Os processos de transmutações são analisados em três escalas [9, 18]; a) mudanças que ocorrem em curtos intervalos de tempo ("short-range"), b) mudanças que ocorrem em intervalos intermediários de tempo ("intermediate-range") e c) mudanças que ocorrem em longos intervalos de tempo ("long term changes").

As mudanças que ocorrem em intervalos de tempo curtos são da ordem de milissegundos para segundos e preocupa-se com transiente de potência devido ao rápido aumento ou diminuição da população de nêutrons quando o reator é perturbado. O estudo deste fenômeno engloba a cinética de reatores, exceto em possíveis condições extremas quando a composição do material do reator não

sofre mudanças neste intervalo de tempo.

A escala intermediária de tempo compreende o período de horas para dias, e um dos problemas é as oscilações de núclídeos tais como o ^{135}Xe e ^{149}Sm , e ao contrário dos intervalos de tempo curtos, a população de nêutrons não sofre mudança tão significativas. Neste caso, a distribuição dos nêutrons sofre algumas variações uma vez que os núclídeos produzidos possuem seções de choque suficientemente altas de modo a competir com o processo de fissão, e portanto são de extrema importância pois afetam a distribuição espacial do fluxo de nêutrons e a criticalidade do sistema.

As mudanças que ocorrem em longos intervalos de tempo compreende meses e/ou anos. São basicamente três tipos os processos de transmutação analisados em mudanças que acontecem em longos intervalos de tempo: a depleção do combustível, a produção de isótopos pesados (actinídeos) e a produção de produtos de fissão. Como esta escala abrange um tempo maior, vários núclídeos devem ser considerados, pois as mudanças nesta escala passam a afetar a economia do reator nuclear. Nas análises de transmutações são observadas a depleção, produção de isótopos pesados e os processos de transmutação que ocorrem nos produtos de fissão durante a operação do reator nuclear e estes estudos são usados para descrever a composição do combustível e, portanto, os ciclos do reator.

Depois de exposto a um fluxo de nêutrons, o combustível começa a ser consumido, então, é necessário balancear e controlar as reações que acontecem no núcleo do reator. Isto é feito por meios externos, tais como a retirada das barras de controle, controle da concentração de boro no refrigerante e adição de venenos queimáveis como o que acontece em reatores do tipo PWR.

Quando um nêutron, é capturado pelo combustível nuclear, inicia-se o processo de fissão com subsequente liberação de energia juntamente com vários processos de formação de núclídeos, a formação de núclídeos pesados (ex. actinídeos)

são um dos parâmetros importantes quando o objetivo é investigar mudanças em longos intervalos de tempo. Os actnídeos são formados pelas capturas de nêutrons e decaimentos radioativos dos materiais combustíveis, a conversão de nuclídeo fértil para físsil é um bom exemplo deste tipo de transmutação e tem grande importância na vida e no controle do reator.

Contudo, durante a queima do combustível nuclear são formados quase 900 nuclídeos, diretamente por fissão, por decaimento radioativo dos produtos de fissão, ou por reações com outros produtos de fissão. A introdução dos vários produtos de fissão na matéria nuclear do reator cria uma série de problemas que devem ser considerados na análise do comportamento do reator nuclear, pois alguns são considerados venenos por possuírem seção de choque e concentrações altas o suficiente para competir com o combustível no processo de absorção de nêutrons e, conseqüentemente, influenciando a absorção e produção de nêutrons e a reatividade do reator.

Alguns nuclídeos provenientes dos produtos de fissão são muito radioativos e decaem por emissão de nêutrons, beta, ou emissão gama. Nêutrons emissores têm uma importante influência sobre a cinética do reator para garantir a segurança da operação do reator. O projeto estrutural do elemento combustível deve ser capaz de prever como os produtos de fissão sólidos e gasosos formados poderão alojar-se de forma que seja possível prever a vida do combustível, e o sistema de remoção de calor deve ser capaz de remover o calor gerado por decaimento radioativo depois do desligamento do reator, e o sistema de segurança deve ser capaz de acomodar o calor proveniente decaimento dos nuclídeos, se houver um acidente por perda de refrigerante. De posse dessas considerações nota-se, que os produtos de fissão também dominam problemas de abastecimento, reprocessamento e economia do reator.

Contudo, existe a questão de como tratar matematicamente e computacionalmente a análise de transmutação. A princípio, as equações de transporte

e a equação de transmutação devem ser escritas para cada uma das espécies constituintes do reator nuclear, geometria específica e composição inicial. Como o tempo progride a composição inicial sofre mudanças sob a influência do fluxo de nêutrons, além disso, o fluxo de nêutrons também depende da densidade de núclídeos através da equação de transporte de nêutrons que deve ser resolvida juntamente com a equação de transmutação.

A resolução dessas duas equações acopladas apresentam uma certa complexidade matemática, de forma que se faz necessário usar técnicas de resolução sofisticadas. Várias técnicas de resolução para o sistema, onde a equação de transporte e a equação de transmutação estão acopladas, são baseadas no processo de desacoplamento destas em um dado intervalo de tempo. Uma aproximação muito utilizada para resolver problemas que envolvem análise temporal é o método quase-estático, onde a equação de transporte de nêutrons deve ser resolvida para um dado intervalo de tempo, assumindo que o fluxo obtido seja constante no intervalo. O próximo passo é calcular para cada região do reator, as densidades de núclídeos. Então, supõe-se que o fluxo de nêutrons independa do tempo. Estas novas densidades de núclídeos são dados de entrada na equação de transporte e o processo é repetido para cada região.

Na próxima secção serão apresentadas as equações que regem a queima de um reator nuclear, a equação de transmutação e a equação de transporte de nêutrons.

2.1 Equação de transmutação e Equação de transporte de nêutrons

A dinâmica de um reator nuclear quando considera-se a dependência temporal é descrita pelo sistema fluxo de nêutrons [11] e densidade de núclídeos [10, 23]. A densidade de todos os núclídeos presentes ou produzidos em um

sistema pode ser descrito pelo vetor densidade de núclídeos definido como

$$\hat{N}_i(\hat{r}, t) = [N_1(\hat{r}, t), N_2(\hat{r}, t), \dots, N_N(\hat{r}, t)], \quad (2.1)$$

onde $N_i(\hat{r}, t)$ é a densidade de um determinado núclídeo i na posição $\hat{r}$ e em um instante de tempo t e N é o número total de núclídeos considerado.

A equação fundamental que descreve a produção e destruição do i -ésimo núclídeo é a equação de balanço que indica a taxa de transmutação do núclídeo i no tempo como sendo igual a taxa de produção (TP) menos a taxa de destruição (TD) do mesmo, que pode ser expressa como :

$$\frac{dN_i}{dt}(\hat{r}, t) = \text{TP} - \text{TD}. \quad (2.2)$$

Neste trabalho, foi utilizado o formalismo de cadeias lineares, então de uma maneira geral a eq.(2.2) pode ser escrita para a concentração do i^{th} núclídeo em uma cadeia linear como,

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_k Y_i^k S^k + \alpha_{i-1} \gamma_{i-1} N_{i-1} - (\lambda_i + A_i^a) N_i, \dots i = 1, 2, 3, \dots, N, \quad (2.3)$$

onde: Y_i^k é a fração de fissão do núclídeo i a partir do núclídeo físsil k , S^k é a taxa de fissão do k_{th} núclídeo fissionável, λ_i é a constante de decaimento do núclídeo i , $A_i^a = \sum_{j=1}^g g_i^j \sigma_{ai}^j \Phi^j$ é a taxa de absorção de nêutrons por unidade de densidade de núclídeo, sendo σ_{ai}^j é a seção de choque de absorção do i^{th} núclídeo no grupo de energia j , g_i^j o fator de auto-blindagem, A_{i-1}^c é a taxa de captura, definida como a taxa de absorção menos a taxa de fissão, matematicamente, $A^c = A^a - A^f$,

As grandezas γ_{i-1} ou λ_{i-1} ou $A_{i-1}^{a,c}$ são definidas de acordo com o acoplamento para o precursor $i - 1$ e α_{i-1} é a fração para o decaimento radioativo.

A eq.(2.3) pode ser generalizada para o n^{th} núclídeo em uma cadeia, assu-

minho fluxo constante e taxa de fissão durante o incremento Δt , e pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} N_n(t + \Delta t) = & \sum_{m=1}^n \frac{1}{\alpha_n \gamma_n} \Pi_{k=m}^n \alpha_k \gamma_k \\ & \left\{ \overline{Y_m} \left[\frac{1}{\Pi_{l=m}^n} - \sum_{j=m}^n \frac{\exp(-\beta_j \Delta t)}{(\beta_j) \Pi_{m=i \neq j}^n (\beta_i - \beta_j)} \right] + \right. \\ & \left. - N_m(t) \left(\sum_{j=m}^n \frac{\exp(-\beta_j \Delta t)}{\Pi_{m=i \neq j}^n (\beta_i - \beta_j)} \right) \right\} \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde $\overline{Y_m S}$ é a taxa média de produção do m-ésimo nuclídeo e $\beta_i = A_i^a + \lambda_i$.

O fluxo de nêutrons é governado pela equação de transporte [11],

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) + \hat{\Omega} \cdot \nabla \Phi + \hat{N}(\hat{r}, t) \cdot \sigma_t(E) \Phi = \\ & \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega}' \int_E dE' \hat{N}(\hat{r}, t) \cdot \hat{\sigma}_f(\hat{r}, \hat{\Omega}', E' \rightarrow \hat{\Omega}, E) \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}', E', t) + \\ & + \frac{X(E)}{4\pi} \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega}' \int_E dE' \hat{N}(\hat{r}, t) \cdot v \hat{\sigma}_f(E') \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}', E', t), \end{aligned} \quad (2.5)$$

sendo $\hat{N}(\hat{r}, t)$ definido pela (2.1), $\hat{\sigma}_t(E)$ é um vetor onde os componentes são as seções de choque microscópicas totais correspondentes a densidade de nuclídeo $\hat{N}$, $\hat{\sigma}_f(\hat{r}, \Omega', E' \rightarrow \hat{\Omega}, E)$ é um vetor onde os componentes são as seções de choque microscópicas diferenciais de espalhamento correspondentes a $\hat{N}$, $v \hat{\sigma}_f(E')$ é um vetor onde os componentes são as fissões produzidas pela interação de nêutrons com a densidade de nuclídeo $\hat{N}$.

O termo $X(E)$ pode ser escrito como,

$$X(E) = (1 - \beta) X_p(E) + \sum_i \beta_i X_{D_i}(E), \quad (2.6)$$

$X_p(E)$ é o espectro de fissão dos nêutrons prontos, $X_{D_i}(E)$ é o espectro de fissão dos nêutrons atrasados para um precursor i , β_i é a fração de nêutrons atrasados do precursor i por fissão, β é a fração efetiva de precursores por

fissão,

As eq.(2.4) e eq.(2.5) constituem um sistema de equações não lineares acopladas e descrevem todo o processo de queima que ocorre em um reator nuclear. Em adição a essas equações, existem vínculos externos impostos pelo sistema do reator nuclear como: criticalidade, densidade máxima de potência e a potência.

A potência pode ser expressa como,

$$P(t) = \int_v d^3\hat{r} \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega} \int_E dE \sum_k G_k N_k(\hat{r}, t) \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) \sigma_{fk}(E), \quad (2.7)$$

onde G_k é a energia média liberada por fissão do nuclídeo k , supondo independência temporal, V é o volume do reator e $P(t)$ a potência especificada dada em função do tempo.

O vínculo de criticalidade é imposto, pois a forma dependente do tempo da equação de transporte tem solução não trivial. Impondo através do vínculo de criticalidade que a solução da equação de transporte seja não trivial, o fluxo de nêutrons não depende explicitamente da variável tempo, a variação temporal será implícita através da densidade de nuclídeo e através das variáveis de controle do reator nuclear.

O vínculo de criticalidade pode ser completado pelo ajuste de variáveis de controle do reator nuclear como as barras de controle ou concentração de algum nuclídeo.

Portanto, a equação de transporte de nêutrons dependente do tempo pode ser escrita como

$$\begin{aligned} & \hat{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) + \hat{N}(\hat{r}, t) \cdot \hat{\sigma}_t(E) \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) = \\ & \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega}' \int_E dE' \hat{N}(\hat{r}, t) \cdot \hat{\sigma}_f(\hat{r}, \hat{\Omega}', E' \rightarrow \hat{\Omega}, E) \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}', E', t) + \\ & + \frac{X(E)}{4\pi} \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega}' \int_E dE' \hat{N}(\hat{r}, t) \cdot \frac{v\hat{\sigma}_f(E')}{k} \Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}', E', t), \end{aligned} \quad (2.8)$$

Usando o operador de Boltzmann a equação acima pode ser escrita de uma maneira compacta como,

$$B(\hat{N}(\hat{r}, t), \hat{C}(\hat{r}, t))\Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) = 0, \quad (2.9)$$

onde $\hat{C}(\hat{r}, t)$ é um vetor onde os componentes são as variáveis de controle do sistema do reator. Dessa maneira, as equações de transmutação e transporte de nêutrons estão completamente fechadas.

As eqs. (2.3), (2.7), (2.9) descrevem o sistema fluxo de nêutrons e densidade de núclídeos para um dado reator, o histórico de potência e condições iniciais. A princípio, estas equações deveriam ser resolvidas de acordo com as condições citadas anteriormente, mas devido a complexidade matemática da equação de transporte, isto não é possível.

Na verdade, a resolução destas equações é possível somente mediante aproximações numéricas, e a técnica mais usada para trabalhar com sistemas deste tipo é através do uso do método quase-estático, que desacopla estas equações em um dado intervalo de tempo com o fluxo variando lentamente. Esta técnica será abordada na próxima secção.

2.2 Aproximação Quase Estática

As mudanças que ocorrem no combustível nuclear, principalmente aquelas que ocorrem em longas escalas de tempo, são melhores tratadas quando todo o tempo de vida do reator é subdividido em um conjunto de intervalos de tempo de forma a considerar as possíveis variações de escala dos campos envolvidos em cada intervalo.

Considere um reator nuclear com um tempo de vida de comprimento T , na aproximação quase estática [9, 18], $\Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ é escrito como o produto do fator forma e a amplitude (ou função potência) a qual possui somente de-

pendência temporal,

$$\Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) = \phi(t)\psi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) \quad \text{para} \quad 0 < t < t_f, \quad (2.10)$$

A função forma ψ é normalizada de forma que

$$\int_V d^3\hat{r} \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega} \int_E dE \psi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) = 1.$$

Substituindo (2.10) em (2.3), (2.7) e (2.9) obtemos o seguinte grupo de equações,

$$B(\hat{N}(\hat{r}, t), \hat{C}(\hat{r}, t))\psi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) = 0, \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt}(\hat{r}, t) &= \theta(t) \sum_k N_k(\hat{r}, t) \int_E dE Y_i^k(E) \sigma_{fk}(E) \psi(\hat{r}, E, t) + \\ &+ \sum_j \gamma_j^i(\hat{r}, t) N_j(\hat{r}, t) - \beta_i(\hat{r}, t) N_i(\hat{r}, t) \\ i &= 1, \dots, N \end{aligned} \quad (2.12)$$

e

$$\theta(t) = \frac{P(t)}{\int_V d^3\hat{r} \int_E dE \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega} \sum_k G_k N_k(\hat{r}, t) \sigma_{fk}(E) \psi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t)}, \quad (2.13)$$

onde:

$$\begin{aligned} \beta_i(\hat{r}, t) &= \lambda_i + \theta(t) \int_E dE \sigma_{ai}(E) \psi(\hat{r}, E, t), \\ \psi(\hat{r}, E, t) &= \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega} \psi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t). \end{aligned}$$

A aproximação quase estática baseia-se em um processo de regularização das equações acima. Para descrever a interação entre a densidade de núclídeos e do fluxo de nêutrons, considere um grande intervalo de tempo subdividido em intervalos de tempo menores.

Suponha que o fluxo varie lentamente com o tempo juntamente com a densi-

dade de núclídeos e as condições de criticalidade sobre estes intervalos de tempo menores, de modo que a solução do fator forma seja assumido constante sobre este intervalo de tempo. Desde que o tamanho do intervalo de tempo seja pequeno, é razoável considerar que a amplitude dependa fracamente da densidade de núclídeos e para que possa ser considerado também independente do tempo e o seu valor deve ser tomado no início deste pequeno intervalo.

No fim de cada pequeno intervalo de tempo, o fluxo de nêutrons deve mudar, pois a densidade inicial de núclídeos é um dado de entrada, usado para resolver (2.4), e a solução obtida é usada em (2.5), no próximo intervalo a solução de (2.5) é usada para resolver (2.4) e assim sucessivamente.

Este processo ocasionará mudanças no fator forma e nas condições de criticalidade que conseqüentemente irá contribuir para mudanças cumulativas no fluxo. Desta maneira, o fluxo de nêutrons e a densidade de núclídeos interagem passo a passo.

Problemas de análise de transmutação raramente são tratados com altos graus de sofisticação. A evolução completa do tempo do fluxo de nêutrons e da densidade de núclídeos requer um grande esforço computacional tornando necessário dividir o tempo em pequenos intervalos.

É comumente utilizado duas aproximações características para promover o desacoplamento do sistema de equações (2.2), (2.12) e (2.13). Inicialmente, restringi-se a interação entre a densidade de núclídeos e o fluxo de nêutrons sobre um dado intervalo de tempo, assumindo que a forma e a amplitude do fluxo são independentes durante um intervalo de tempo qualquer. Posteriormente, assume-se que o fator forma é independente do tempo no intervalo, com isso as equações da densidade de núclídeos e da amplitude são separadas sobre o intervalo formando um grupo de equações desacopladas.

Neste ângulo a interação entre a densidade de núclídeos e o fluxo de nêutrons é considerada no sentido de grande escala de tempo devido as mudanças no fator

forma e em pequena escala devido a interação entre a amplitude e a densidade de núclídeos do combustível. Entretanto, assumir o fator forma independente do tempo no intervalo implica automaticamente que o fluxo terá a mesma distribuição em cada região do reator no intervalo considerado.

Mas se a densidade de fissão é uma função que varia lentamente no reator nuclear, a densidade de potência é independente do tempo durante o intervalo de tempo considerado. Esta hipótese com permite assumir que a média total do fator forma calculada sobre as região do reator, em um tempo t , independenda do tempo durante um intervalo de tempo uma vez que a média do fator forma é assumida independente do tempo. Desta maneira, o comportamento em uma determinada região será distinguida de outras regiões, estas considerações serão importantes para analisar a interação entre a densidade de núclídeos e fluxo de nêutrons para um dado reator finito.

Na próxima seção serão mostradas algumas técnicas de solução da equação de transmutação, com um maior ênfase na transformada de Laplace.

2.3 Solução da Equação de Transmutação

O sistema de equações (2.10), (2.2), (2.12) e (2.13) descrevem completamente a evolução temporal entre a interação do fluxo e da densidade de núclídeos. Em teoria essas equações podem ser resolvidas para um dado reator, histórico de potência e considerações iniciais, embora na prática, estas equações são somente expressões formais para os processos de transmutação e transporte de nêutrons e servem como base para as técnicas de aproximações mais usadas em física de reatores. Não se pode aplicar facilmente estas equações em problemas conhecidos devido a sua complexidade matemática. Esta complexidade se deve principalmente a equação de transporte de nêutrons.

Simplificações aparentemente grosseiras, embora necessárias, são feitas nesta

equação, como por exemplo, trocar o operador transporte pelo operador difusão e utilizar uma estrutura de multigrupos para a energia do nêutron para que esta torne-se discreta. Estas são simplificações muito utilizadas nos cálculos de reatores nucleares e resolvem completamente o problema da complexidade matemática da equação de transporte.

Já na equação de transmutação, o problema matemático da sua resolução resume-se em resolver uma equação diferencial de forma que esta seja aproximada para um grupo de equações de diferenciais de primeira ordem, estas equações são matematicamente e computacionalmente simples de serem resolvidas.

A princípio, os processos de transmutações que ocorrem no interior de um reator nuclear são descritos definindo as cadeias de eventos pelos quais os núclídeos estão sujeitos, como os tipos de reações nucleares que os núclídeos possam vir a sofrer. Se a cadeia a ser observada possuir uma certa simplicidade é possível obter as soluções das equações de transmutação de forma analítica ou semi-analítica.

Mas, se a cadeia do problema exibir uma certa complexidade, como por exemplo o decaimento dos produtos de fissão, concentrações de combustível reprocessado, entre outros, será necessário a utilização de métodos numéricos para obter as soluções da equação de transmutação de uma maneira mais completa.

Existem duas aproximações utilizadas para tratar o grupo de equações lineares de primeira ordem (2.12): o método de matriz exponencial [35, 36, 37] e o método de cadeias lineares [38].

O método de matriz exponencial consiste basicamente em expressar o núclídeo $N_i(z, t)$ e escrever a (2.12) em sua forma matricial, a solução da matriz pode ser obtida como uma exponencial matricial, onde o termo exponencial é expandido em uma série de Taylor e a série é truncada em uma ordem específica,

este método é amplamente usado em métodos numéricos modernos [36] para a resolução e linearização das equações de decaimento.

No método de cadeias lineares, a equação de (2.3) é resolvida por transformada de Laplace [23], e as cadeias são separadas através de um "corte". Este "corte" vai depender da cadeia observada e do intervalo de tempo a ser observado e é escolhido através da análise das cadeias.

São utilizados em física de reatores alguns códigos que solucionam cadeias complexas para a obtenção das concentrações dos núclídeos que regem um determinado problema, alguns exemplos destes códigos como o BISON, ORIGEN, CINDER, podem ser encontrados em [36, 38, 39, 40, 41, 42].

Maiores detalhes sobre o método de solução das equações de decaimento podem ser encontrados no Apêndice B.

Para resolver as cadeias de decaimento foi utilizado o código CINEW, que foi desenvolvido durante este trabalho, que como o código CINDER lineariza as cadeias de decaimento utilizando o método de cadeias lineares.

O código desenvolvido neste trabalho possui um adicional em relação ao CINDER, que foi o código usado para testar os resultados obtidos pelo CINEW, calcula também as concentrações em sua forma adjunta e os coeficientes de sensibilidade através do método utilizado neste trabalho.

A teoria adjunta por um longo tempo foi utilizada como uma função matemática, a sua utilização em física de reatores [43] tornou possível uma interpretação física desta função.

Na próxima secção será mostrada a forma adjunta para a equação de decaimento, que é utilizada no método matemático proposto neste trabalho e como mostraremos mais adiante é de grande importância para a interpretação das concentrações.

2.4 Equação de Decaimento Adjunta

Considere a seguinte cadeia direta,

$$N_1 \rightarrow N_2 \rightarrow N_3 \rightarrow N_i. \quad (2.14)$$

A eq.(2.3) pode ser reescrita de uma maneira geral como,

$$\frac{dN_i}{dt} = \Gamma_i + \omega_{i-1}N_{i-1} - \eta_i N_i, \quad (2.15)$$

onde:

$$\Gamma_i = \sum_k y_i^k S^k, \quad (2.16)$$

$$\eta_i = (\lambda_i + A_i^a), \quad (2.17)$$

$$\omega_{i-1} = \alpha_{i-1} \gamma_{i-1}, \quad (2.18)$$

sendo α e γ escolhidos de acordo com o acoplamento do nuclídeo predecessor.

As equações para a cadeia (2.14)

$$\frac{dN_1}{dt} = \Gamma_1 - \eta_1 N_1, \quad (2.19)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \Gamma_2 + \omega_1 N_1 - \eta_2 N_2, \quad (2.20)$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \Gamma_3 + \omega_2 N_2 - \eta_3 N_3, \quad (2.21)$$

...

$$\frac{dN_i}{dt} = \Gamma_i + \omega_{i-1} N_{i-1} - \eta_i N_i. \quad (2.22)$$

Escrevendo as equações acima em sua forma matricial teremos

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \omega_1 & \eta_2 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \omega_2 & \eta_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \omega_{i-1} & \eta_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ \vdots \\ \Gamma_i \end{pmatrix}, \quad (2.23)$$

A matriz acima é a forma matricial das equações de decaimento para um nuclídeo i em um tempo t , desta forma é fácil obter as equações adjuntas,

$$-\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_i^* \\ \vdots \\ N_3^* \\ N_2^* \\ N_1^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_i & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \omega_{i-1} & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & \ddots & \eta_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \omega_2 & \eta_2 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \omega_1 & \eta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_i^* \\ \vdots \\ N_3^* \\ N_2^* \\ N_1^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Gamma_i^* \\ \vdots \\ \Gamma_3^* \\ \Gamma_2^* \\ \Gamma_1^* \end{pmatrix}, \quad (2.24)$$

a matriz que contém as seções de choque, constantes de decaimento, etc.

Por simplicidade devemos fazer a seguinte mudança de variável no tempo,

$$s \rightarrow T_f - t, \quad (2.25)$$

$$ds = -dt, \quad (2.26)$$

Para $T_f = 0$, temos que $s = -t$, então vamos utilizar s , e a partir da eq.(2.19) escrevemos a sua equação adjunta. Temos então de uma maneira geral a forma adjunta para a equação de transmutação

$$\frac{dN_i^*}{ds} = \Gamma_i^* - \eta_i N_i^*, \quad (2.27)$$

$$\frac{dN_{i-1}^*}{ds} = \Gamma_{i-1}^* + \omega_{i-1} N_i^* - \eta_{i-1} N_{i-1}^*, \quad (2.28)$$

$$\frac{dN_{i-2}^*}{ds} = \Gamma_{i-2}^* + \omega_{i-2}N_{i-1}^* - \eta_{i-2}N_{i-2}^*. \quad (2.29)$$

...

Note que a transposição da matriz M nos dá o significado matemático da inversão da cadeia de decaimento na teoria adjunta

$$N_i^* \rightarrow N_3^* \rightarrow N_2^* \rightarrow N_1^*. \quad (2.30)$$

Para um sistema sem fontes podemos escrever as equações adjuntas de decaimento como

$$\frac{dN_i^*}{ds} = -\eta_i N_i^* \quad (2.31)$$

$$\frac{dN_{i-1}^*}{ds} = \omega_{i-1}N_i^* - \eta_{i-1}N_{i-1}^* \quad (2.32)$$

$$\frac{dN_{i-2}^*}{ds} = \omega_{i-2}N_{i-1}^* - \eta_{i-2}N_{i-2}^* \quad (2.33)$$

$$\frac{dN_1^*}{ds} = \omega_1N_2^* - \eta_1N_{*i} \quad (2.34)$$

Uma vez obtida a equação de decaimento em sua forma adjunta podemos agora obter as soluções dessas equações através da transformada de Laplace, que estão demonstrados no Apêndice [B](#).

Capítulo 3

Análise de sensibilidade

Como vimos, a teoria de análise de sensibilidade possui dois métodos tradicionalmente usados para o cálculo de coeficientes de sensibilidade em física de reatores: o método diferencial e o método da teoria da perturbação generalizada.

No método diferencial, o coeficiente é obtido diretamente a partir da diferenciação das equações que regem o problema em relação ao dado nuclear de interesse. No método da perturbação generalizada, os coeficientes de sensibilidade são calculados a partir da perturbação do dado nuclear de interesse e posterior linearização das equações que regem o problema, incluindo o parâmetro integral, então, o coeficiente de sensibilidade é calculado com o auxílio das equações adjuntas.

Os dois métodos fornecem os mesmos resultados para os coeficientes de sensibilidade [2, 44], embora, computacionalmente possam apresentar dificuldades numéricas, por exemplo, no método diferencial é necessário calcular para cada dado nuclear as equações que descrevem o problema e no método da perturbação generalizada para cada parâmetro integral é necessário o cálculo das funções adjuntas que regem o problema.

Neste capítulo será feita uma breve exposição teórica destes dos métodos tradicionais utilizados em física de reatores para o cálculo dos coeficientes de

sensibilidade e o método matemático proposto neste trabalho.

3.1 Método Diferencial

As equações fundamentais que descrevem os processos de transmutação e transporte de nêutrons que ocorrem em um reator nuclear, que foram apresentadas no Capítulo 1, são elas as eqs. (2.3) que é a equação de transmutação, a (2.7) que é o vínculo de potência e a (2.9) que é a equação de transporte de nêutrons. Essas equações descrevem a evolução do fluxo de nêutrons e densidade de núclídeos. Na aproximação quasi-estática mostrada no Capítulo 2, estas equações são linearizadas para um dado intervalo de tempo.

Como citado anteriormente a grandeza fundamental para cálculos em análise de sensibilidade são os coeficientes de sensibilidade, que são definidos como a razão entre a variação percentual do parâmetro integral pela variação percentual do dado nuclear básico ,

$$S_k = \frac{\delta R/R}{\delta \alpha_k/\alpha_k} \quad (3.1)$$

O significado matemático do coeficiente de sensibilidade nos possibilita determinar quais parâmetros são de maior importância quando relacionados com os dados em questão. A grandeza que possuir o maior coeficiente de sensibilidade é a grandeza mais importante para um dado parâmetro integral. Sendo assim a razão matemática que é descrita pela eq.(3.1), estabelece um elo de ligação entre as incertezas do parâmetro integral e do dado nuclear básico a ser observado.

O dado nuclear é representado por um vetor $\hat{\alpha}(E)$ definido como,

$$\hat{\alpha}(E) = [\alpha_1^1(E), \alpha_1^2(E), ..., \alpha_i^j(E), ...], \quad (3.2)$$

onde $\alpha_i^j(E)$ é o dado nuclear básico do núclídeo i , e j é o tipo de dado nuclear

em uma energia E .

De um maneira geral, a energia do nêutron E deve ser explícita em relação a $\hat{\alpha}(E)$, mas os componentes do vetor $\hat{\alpha}(E)$ também representam dados que não dependem da energia do nêutron como: constante de decaimento, "branching", etc., e dados que dependem de duas energias, E e E' , como a seção de choque diferencial.

Os parâmetros integrais são grandezas estudadas durante a vida do reator nuclear como densidade de núclídeos, taxa de conversão, taxa de consumo de urânio, fração de potência, etc, e em alguns trabalhos é chamado de resposta. Neste trabalho, é conveniente nomear estas grandezas como parâmetros integrais, que são definidos como um funcional explícito do fluxo de nêutrons e densidade de núclídeos, e componentes específicos do dado nuclear.

Neste caso, podemos escrever o parâmetro integral como,

$$R(t) = \int_V d^3r \int_E dE \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega} R[\Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t), \hat{N}(\hat{r}, t), \hat{\alpha}], \quad (3.3)$$

onde, $\hat{\alpha}$ é um vetor n -dimensional cujo componentes contém os componentes do dado nuclear na qual o parâmetro integral $R(t)$ possui dependência explícita, $\hat{N}(\hat{r}, t)$ que é o vetor contendo todos os i núclídeos na posição $\hat{r}$ e no tempo t , $\phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ é o fluxo angular de nêutrons. Em análise de sensibilidade, o vetor $\hat{\alpha}$ é chamado de vetor realização [45], a dependência funcional de $R(t)$ sobre a densidade de núclídeos $\hat{N}$ e sobre o vetor realização é sempre na forma de produto escalar. O dado nuclear contido no vetor realização é o dado nuclear correspondente as componentes da densidade de núclídeos N , para um núclídeo que ainda não sofreu transmutações.

Ao definirmos matematicamente o parâmetro integral $R(t)$ e o dado nuclear

α_k , podemos escrever a eq.(3.1)

$$\frac{\Delta R(t)}{R(t)} = S(\hat{r}, t) \frac{\Delta \alpha_k(E)}{\alpha_k(E)} + \text{termos de ordens superiores}, \quad (3.4)$$

onde $\Delta R(t)$ representa as mudanças de $R(t)$ devido as mudanças de α_k e $S(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ é o coeficiente de sensibilidade na posição $\hat{r}$, para um nêutron de energia E , na direção $\hat{\Omega}$, em um tempo t .

A eq.(3.4) é a expressão desejada para determinar as mudanças de $R(t)$ em relação a α_k e também é conveniente o seu uso como definição de coeficiente de sensibilidade.

Logo para determinar os coeficientes de sensibilidade, primeiramente deve-se considerar uma pequena variação do dado nuclear α_k do estado não perturbado, os efeitos dessa perturbação devem refletir na densidade de núclídeos, no fluxo de nêutrons, nas variáveis de controle do sistema e em $R(t)$.

Considere o parâmetro integral $R(t)$ como um funcional explícito de α_k e note que $\Phi(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ e $\hat{N}(r, t)$ são funcionais explícitos de α_k através das equações que governam o sistema do reator. Portanto, $R(t)$ pode ser expandido em uma série de Taylor funcional [46] em torno de α então:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta R(t)}{R(t)} = \int_V d^3\hat{r} \int_E dE \int_{\hat{\Omega}} d\hat{\Omega} \left[\frac{\partial R}{\partial \alpha_k} + \frac{\partial R}{\partial \hat{N}} \cdot \frac{d\hat{N}}{d\alpha_k} + \frac{\partial R}{\partial \Phi} \frac{d\Phi}{d\alpha_k} \right] \frac{\Delta \alpha_k}{R(t)} \\ + \text{termos de ordens superiores}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde $R'(t)$ é perturbado a partir de $R(t)$, e $\partial/\partial \alpha_k$, $\partial R/\partial \hat{N}$, $\partial R/\partial \Phi$ são derivativas funcionais de $R(t)$.

Desprezando os termos de segunda ordem e ordens superiores, a eq.(3.5) é equivalente a

$$S_k(\hat{r}, \hat{\Omega}, E, t) = \frac{\alpha_k}{R(t)} \left[\frac{\partial R}{\partial \alpha_k} + \frac{\partial R}{\partial \hat{N}} \cdot \frac{d\hat{N}}{d\alpha_k} + \frac{\partial R}{\partial \Phi} \frac{d\Phi}{d\alpha_k} \right]. \quad (3.6)$$

A equação acima é uma maneira particular de escrever matematicamente o coeficiente de sensibilidade, mas pode ser aplicada para qualquer tipo de parâmetro integral e dado nuclear [17, 44]. O primeiro termo entre colchetes da eq.(3.6) representa o efeito direto do dado nuclear α_k sobre $R(t)$, enquanto os dois últimos termos representam o efeito da densidade de núclídeos e do fluxo de α_k sobre $R(t)$, respectivamente.

O problema para determinar o coeficiente de sensibilidade através do método diferencial resume-se em obter as derivativas da densidade de núclídeos e do fluxo de nêutrons em relação a α_k . Essas derivativas de $R(t)$ em relação a α_k podem ser facilmente obtidas desde que $R(t)$ seja um funcional explícito destas quantidades. Por outro lado, a determinação destas derivativas não é uma tarefa simples já que a densidade de núclídeos e o fluxo de nêutrons estão conectados através das equações de transmutação e fluxo de nêutrons.

Para obter as derivativas $d\hat{N}/d\alpha_k$ e $d\Phi/d\alpha_k$, a eq.(2.3) pode ser escrita na notação matricial como,

$$\frac{d\hat{N}}{dt}(\hat{r}, t) = \hat{M}(\hat{r}, t)\hat{N}(\hat{r}, t), \quad (3.7)$$

onde $\hat{M}(\hat{r}, t)$ é uma matriz $N \times N$ que contém as taxas de reações, as constantes de decaimento, fatores de acoplamento e fração de fissão.

Agora considere as derivativas das eqs.(3.7), (2.7) e (2.9) em relação a α_k ,

$$B(\hat{N}, \hat{C}) \cdot \frac{d\Phi}{d\alpha_k} + \frac{\partial B}{\partial \hat{N}} \cdot \frac{d\hat{N}}{d\alpha_k} \Phi = -\frac{\partial B}{\partial \hat{C}}(\hat{N}, \hat{C}) \cdot \frac{d\hat{C}}{d\alpha_k} \Phi - \frac{\partial B}{\partial \alpha_k}(\hat{N}, \hat{C}), \quad (3.8)$$

$$\left[\hat{M}(\hat{r}, t) - \frac{d}{dt} \right] \frac{d\hat{N}}{d\alpha_k} + \frac{\partial \hat{M}}{\partial \Phi} \cdot \hat{N} \frac{d\Phi}{d\alpha_k} = -\frac{\partial \hat{M}}{\partial \alpha_k} \hat{N}, \quad (3.9)$$

$$\frac{dP(t)}{d\alpha_k} = 0. \quad (3.10)$$

O sistema de equações diferenciais acima é composto por três equações, que re-

presentam um sistema não-linear e acoplado, que mostram claramente a interdependência de $d\hat{N}/d\alpha_k$ e $d\Phi/d\alpha_k$. O contorno e as condições iniciais aplicadas em (3.8) e (3.9) são obtidos através das derivativas do contorno e das condições iniciais das equações do fluxo de nêutrons e densidade de núclídeos em relação a α_k .

A determinação do coeficiente de sensibilidade através do método diferencial baseia-se em resolver o sistema de equações não-lineares acoplado acima, respeitando os vínculos impostos, pois qualquer mudança no dado nuclear, conduz a uma mudança na variável de controle, gerando incertezas no dado nuclear.

Na introdução deste trabalho foram citados duas teorias utilizadas em análise de sensibilidade envolvendo transmutações, o formalismo acoplado e desacoplado. O formalismo acoplado ao considerar-se $d\hat{N}/d\alpha_k$ e $d\Phi/d\alpha_k$, a não linearidade entre essas duas quantidades é completamente preservada.

Os procedimentos usados para calcular os coeficientes de sensibilidades, embora completos, não podem ser aplicados diretamente, pois $d\Phi/d\alpha_k$ e $d\hat{N}/d\alpha_k$ são não-lineares e acoplados, e considerar essas duas grandezas requer cálculos exaustivos. Uma alternativa então a princípio é utilizar a teoria da perturbação generalizada muito difundida por Gandini [47], que será brevemente discutida na próxima seção.

3.2 Método da Teoria da Perturbação Generalizada

Como é conhecido o primeiro trabalho a propôr o uso da teoria da perturbação em física de reatores foi o trabalho de Wigner [4], em 1945, onde o autor propôs o estudo de quantidades fundamentais em física de reatores, como a reatividade de barras de diferentes materiais.

Posteriormente, as primeiras formulações da Teoria da Perturbação Generalizada (TPG) foram baseadas em conceitos de mecânica quântica e teve a

contribuição de muitos autores, um exemplo dessas contribuições foi Soodak [48], que deu uma interpretação heurística para a função adjunta, vista como proporcional a importância de nêutrons em relação a potência assintótica de um sistema crítico e multiplicativo, e Usachev [49] que incluiu os nêutrons prontos e os nêutrons atrasados na TPG.

Até então o uso da teoria da perturbação era usada como uma ferramenta matemática, mas Lewis[43] em 1960 identificou na função adjunta uma importância associada ao detector. Dessa maneira, o conceito de importância desenvolveu-se juntamente com a matemática que descreve a teoria da perturbação, que primeiramente foi desenvolvida em primeira ordem, evoluindo para ordens superiores [19], cálculos de blindagem, decaimentos [45], termohidráulica [50], entre outros.

Os primeiros cálculos, como relatados anteriormente, consistiam em uma perturbação de primeira ordem no parâmetro a ser observado, no caso, o parâmetro observado foi a reatividade.

Os experimentos envolvendo coeficientes de reatividade são de grande importância no que diz respeito ao desempenho e segurança do reator. A princípio, calculava-se a acurácia dos experimentos de barra, onde era observada as alterações da reatividade, a fim de escolher um melhor método computacional para um dado problema.

Os efeitos da perturbação na reatividade, levou os pesquisadores da época (por volta da década de 1960) a considerar a perturbação do fluxo, então era necessário uma teoria para calcular a variação do fluxo perturbado, desenvolveu-se então a teoria da perturbação generalizada, que consistia na teoria da perturbação com o auxílio das equações adjuntas.

O segundo passo no desenvolvimento da teoria da perturbação, foi a extensão dos cálculos de primeira ordem, para os cálculos de segunda ordem [6]. Contribuições significantes de outros autores podem ser encontradas em

[7, 47, 51, 52, 53, 54, 55, 56, 57, 58, 59].

Para uma breve demonstração do cálculo do coeficiente de sensibilidade envolvendo reatividade [60] e usando a teoria adjunta, façamos o dado nuclear de interesse que neste trabalho chamamos de α , igual a reatividade ρ e R , que é o parâmetro integral igual a seção de choque macroscópica Σ_x , onde x pode ser qualquer tipo de reação, tomemos a equação de Boltzmann escrita da seguinte maneira,

$$(L - \lambda F) \Phi = 0, \quad (3.11)$$

onde $\lambda = 1/k$, e F é a matriz que contém os termos de fissão e L as perdas que podem vir a sofrer os nêutrons durante a difusão no meio, a partir de uma perturbação das seguintes grandezas,

$$\Phi' = \Phi + \delta\Phi, \quad (3.12)$$

$$L' = L + \delta L, \quad (3.13)$$

$$\lambda' = \lambda + \delta\lambda, \quad (3.14)$$

$$F' = F + \delta F, \quad (3.15)$$

dessa maneira podemos escrever a eq.(3.11) em seu estado perturbado como,

$$(L' - \lambda' F') \Phi' = 0. \quad (3.16)$$

Desse modo temos as equações adjuntas para (3.11)

$$(L^* - \lambda F^*) \Phi^* = 0, \quad (3.17)$$

multiplicando a eq.(3.17) por $\langle \Phi^* |$, integrando sobre todo o espaço de fase, desprezando os termos menores, usando notação de brackets e fazendo as devidas

operações algébricas

$$\left\langle \Phi^* \left| (L' - \lambda' F') \right| \Phi \right\rangle, \quad (3.18)$$

$$\langle \Phi^* | \delta F | \Phi \rangle = \delta \lambda \langle \Phi^* | F | \Phi \rangle + \lambda \langle \Phi^* | \delta F | \Phi \rangle, \quad (3.19)$$

$$\delta \lambda \langle \Phi^* | F | \Phi \rangle = \langle \Phi^* | \delta L | \Phi \rangle - \lambda \langle \Phi^* | \delta F | \Phi \rangle, \quad (3.20)$$

$$\delta \lambda = \frac{\langle \Phi^* | \delta L | \Phi \rangle - \lambda \langle \Phi^* | \delta F | \Phi \rangle}{\langle \Phi^* | F | \Phi \rangle}, \quad (3.21)$$

sendo

$$\lambda = \frac{1}{k}, \quad (3.22)$$

$$\delta \lambda = \frac{1}{k^2} \delta k, \quad (3.23)$$

$$\frac{1}{k^2} \delta k = \frac{\langle \Phi^* | \delta L | \Phi \rangle - \frac{1}{k} \langle \Phi^* | \delta F | \Phi \rangle}{\langle \Phi^* | F | \Phi \rangle} \quad (3.24)$$

$$\frac{\delta k}{k} = \frac{\frac{1}{k} \langle \Phi^* | \delta L | \Phi \rangle - \langle \Phi^* | \delta F | \Phi \rangle}{\langle \Phi^* | F | \Phi \rangle} \quad (3.25)$$

da equação acima temos a variação de k , ao sofrer uma perturbação nos parâmetros Φ , L , λ , e F , para calcularmos o coeficiente de sensibilidade da variação da reatividade em relação a seção de choque Σ_x , onde x pode ser uma reação qualquer,

$$\frac{\delta k}{k} / \frac{\Sigma_x}{\delta \Sigma_x} = \frac{\Sigma_x}{k} \frac{\frac{\langle \Phi^* | \delta L | \Phi \rangle}{\delta \Sigma_x} - \frac{k \langle \Phi^* | \delta F | \Phi \rangle}{\delta \Sigma_x}}{\langle \Phi^* | F | \Phi \rangle} \quad (3.26)$$

onde o lado esquerdo da equação acima temos a definição de coeficiente de sensibilidade da reatividade em relação a seção de choque macroscópica x [61].

Na próxima secção serão apresentadas as equações adjuntas de queima para o caso quase-estático, para um melhor entendimento, no apêndice D é apresentada a teoria da perturbação generalizada para a teoria adjunta.

3.3 Equações adjuntas de queima para o caso quase-estático

Como vimos na secção (3.1), o cálculo dos coeficientes de sensibilidade através do método diferencial, consiste em diferenciar as equações de queima em relação ao dado nuclear. Para problemas simples [62] este método pode ser satisfatório, mas para problemas complexos o método pode ser bastante exaustivo. Isto motivou ao desenvolvimento da teoria da perturbação generalizada, primeiramente envolvendo problemas em estado estacionário.

A teoria da perturbação generalizada foi desenvolvida usando as equações adjuntas de queima, onde o coeficiente de sensibilidade é obtido independente da perturbação do dado nuclear, eliminando a dependência do dado nuclear.

Gandini [19] preveu o problema na perturbação do fluxo e sob fortes restrições, excluiu a perturbação do fluxo nas condições iniciais e na normalização. Williams e Weisbein [21] mostraram mais tarde que essas quantidades podem ser desprezadas em aproximações de primeira ordem, mas deve-se considerar uma pequena variação para casos de interesse.

Então, considerando a depleção pontual e que não haja perturbação no fluxo a eq.(3.6) para o coeficiente de sensibilidade pode ser simplificada, a derivada dependente do fluxo ($d\Phi/d\alpha_k = 0$) torna-se zero, excluindo a dependência do fluxo e a derivada $dN/d\alpha_k$ pode ser encontrada independente de $d\Phi/d\alpha_k$, após obtermos $dN/d\alpha_k$ a partir da derivada direta da equação de decaimento pelo dado nuclear, multiplicamos o resultado pelas concentração adjuntas dos núclídeos do problema N^* , então (3.6) é equivalente a

$$S_k(t) = \frac{\alpha_k}{R} \left(\frac{\partial R}{\partial \alpha_k} + N^* \frac{\partial M}{\partial \alpha_k} N \right), \quad (3.27)$$

onde N^* é o núclídeo adjunto desacoplado e é dado por um vetor que contém as equações adjuntas de decaimento, e obedece a seguinte equação e condições

de partida,

$$M^T N^* = -\frac{\partial}{\partial t} N^* - \frac{\partial R}{\partial N}, \quad 0 \leq t < t_f, \quad (3.28)$$

$$N^*(t_f) = 0. \quad (3.29)$$

Para o caso especial onde R é uma delta de Dirac em t_f , as eqs.(3.28) e (3.29) são equivalentes a

$$M^T N^* = \frac{\partial}{\partial t} N^*, \quad 0 \leq t < t_f, \quad (3.30)$$

$$N^*(t_f) = \frac{\partial R}{\partial N}. \quad (3.31)$$

Essas são as equações adjuntas de queima calculadas por Gandini, e são válidas se o efeito da perturbação do fluxo sobre a resposta é pequeno.

Para o caso desacoplado as equações adjuntas de queima foram aplicadas com bons resultados em [21, 63]

O formalismo desacoplado [21, 63] é aplicado com sucesso no projeto do reator, quando o valor do fluxo é calculado e salvo, para posteriormente servir de entrada. Outro exemplo que devemos citar são os experimentos com irradiação de amostras, se uma pequena amostra de algum nuclídeo é irradiada no reator por algum período de tempo, as análises químicas dos produtos obtidos podem ser usados para o estudo de seções de choque, como a amostra é pequena o fluxo não é perturbado pelos nuclídeos da amostra, normalmente o valor do fluxo é medido.

Nestes casos, a aproximação usando o formalismo desacoplado é satisfatória, e os coeficientes de sensibilidade são calculados por intermédio de eq.(3.27). Contudo, para problemas que envolvam um maior grau de complexidade, o uso desta aproximação não é adequada. Kallfelz [22], usou a teoria da perturbação no caso estático para estudos envolvendo o fluxo de nêutrons. Neste estudo, ele usou (3.30) para o campo dos nuclídeos e vários parâmetros integrais, observou

mudanças na forma do fluxo, enquanto as mudanças na normalização foram insignificantes.

Esta deficiência das equações adjuntas desacopladas, levou ao desenvolvimento da teoria da perturbação usando a aproximação quasi-estática, onde as equações de queima são tratadas usando o formalismo acoplado (aproximação de Albeit) [44].

Na próxima secção será apresentado o formalismo matemático proposto neste trabalho para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade.

3.4 Método Proposto

Mostramos anteriormente que o uso do método diferencial para a obtenção dos coeficientes de sensibilidade requer cálculos exaustivos e demorados mesmo com o uso de computadores modernos. Isto deve-se a dependência do dado nuclear α_k , que residem nas derivadas totais $d\hat{N}/d\alpha_k$ e $d\Phi/d\alpha_k$. Essas derivadas são calculadas através das eq.(3.8), (3.9) e (3.10) e os resultados obtidos são aplicados na eq.(3.6) que é a equação geral para o coeficiente de sensibilidade, logo são necessárias quatro equações para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade através do método diferencial. Contudo, deve-se considerar também que qualquer mudança no dado nuclear, conduzirá em uma mudança no cálculo dessas equações.

Segundo Santos [9], as desvantagens do método diferencial podem ser compensadas em estudos que envolvam muitos parâmetros integrais, um exemplo típico seria problemas de análise de transmutação, a partir do inventário de núclídeos escolhe-se os os parâmetros integrais de interesse para um dado nuclear específico, para este caso o método diferencial é uma boa escolha desde que, seja possível recalcular as funções adjuntas para cada parâmetro integral eliminado. Além disso, as derivadas em relação a Φ e $\hat{N}$ em relação ao dado

nuclear podem ser utilizadas para qualquer tipo de resposta, sendo esta, um funcional explícito de Φ , $\hat{N}$ e $\hat{\sigma}$. E desde que uma expressão analítica para a contribuição parcial da densidade de núclídeos possa ser obtida, o método diferencial é uma opção a ser utilizada, pois é fácil interpretar os resultados.

O método da teoria da perturbação generalizada, independe do dado nuclear, e apesar de ser possível neste método obter o cálculo dos coeficientes somente através dos parâmetros integrais, é necessário obter as funções adjuntas para cada parâmetro integral particular.

Contudo, como mostrou Obloz [2], os resultados obtidos para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade por ambos os métodos são os mesmos, embora tenha considerado problemas em estado estacionário, uma extensão para problemas que envolvam dependência temporal pode ser obtida.

Surge a necessidade de um novo método matemático para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade que não dependa do dado nuclear e não possua cálculos exaustivos, como no caso do método diferencial ou que não possua a necessidade do cálculo das funções adjuntas para cada parâmetro integral, como acontece na teoria da perturbação generalizada.

A proposta de um novo método matemático, que não possua as dificuldades encontradas em ambos os métodos usados e que forneça os mesmos resultados de cálculos que os métodos tradicionais apresentam, pode ser uma nova alternativa a ser utilizada em análise de sensibilidade.

Essa é a proposta deste trabalho, através da união dos dois métodos tradicionalmente usados para obter um método matemático para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade que supra as dificuldades encontradas pelos métodos usados.

Dada a equação para o coeficiente de sensibilidade, apresentada no Apêndice

D, derivada por Williams [9, 18],

$$S_{\alpha(\hat{r}, E)} = \frac{\alpha}{R} \left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial R}{\partial \alpha(r, E)} + \sum_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}} N^*(\hat{r}, t) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} M_i N(\hat{r}, t) dt + \\ & - \sum_i \left[\Gamma_i^*(\hat{\rho}) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} B_i \psi_i(\hat{\rho}) \right]_{\Omega} + \\ & - \sum_i P_i^* \left[\psi_i(\hat{\rho}) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} \sigma_{\mathbf{f}} N_i(\hat{r}) \right]_{\Omega} \end{aligned} \right\}, \quad (3.32)$$

onde $\hat{N}_i^*, \Gamma_i^*, P_i^*$, são as soluções adjuntas para a densidade de núclídeos, o fator forma e o vínculo de potência, $\alpha(\hat{r}, E)$, é o dado nuclear, t , intervalo de tempo na aproximação quase-estático, E , pode ser a energia do nêutron ou um grupo de energia, r , pode ser a posição ou uma região do reator.

O segundo termo do lado direito da eq.(3.32) refere-se a densidade de núclídeos direta e adjunta, os outros dois termos diz respeito a equação de Boltzmann e o vínculo de potência, vemos que essa equação separa a contribuição dos nêutrons em duas partes o fator forma e a contribuição do fator de normalização.

Para obtermos o coeficiente de sensibilidade proposto por este trabalho igualamos $R = N_i$, na equação geral para o coeficiente de sensibilidade dada pela eq.(3.6), fazendo isto nos resta apenas o termo que diz respeito a derivativa total do núclídeo em relação ao dado nuclear, pois as derivativas do fluxo não dependem explicitamente de $\hat{N}$, sendo assim

$$S_k = \frac{\alpha_k}{R} \left(\frac{\partial \hat{N}}{\partial \alpha_k} + \frac{d\hat{N}}{d\alpha_k} \right). \quad (3.33)$$

Ao olharmos para a eq.(3.33) o termo que se refere a densidade de núclídeos é dado por

$$\sum_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}} N^*(\hat{r}, t) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} M_i N(\hat{r}, t) dt, \quad (3.34)$$

então ao inserirmos este termo em eq.(3.33) temos

$$S_k = \frac{\alpha_k}{R} \left(\frac{\partial \hat{N}}{\partial \alpha_k} + \sum_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}} N^*(\hat{r}, t) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} M_i N(\hat{r}, t) dt \right), \quad (3.35)$$

que é o coeficiente de sensibilidade proposto por este trabalho, onde M é a matriz que contém o fluxo e a seção de choque.

O cálculo do coeficiente de sensibilidade através da equação proposta por este trabalho resume-se em obter a concentração adjunta e derivar a matriz M em relação ao dado nuclear escolhido, sem a necessidade de várias equações acessórios ou cálculos exaustivos analítica ou computacionalmente, e sem as dependências do dado nuclear ou do parâmetro integral, logo é possível calcular rapidamente o coeficiente de sensibilidade uma vez escolhido o parâmetro integral e o dado nuclear.

No próximo capítulo serão mostrados alguns exemplos de aplicação que apesar de possuírem pouco grau de dificuldade, demonstram de maneira eficaz, o método matemático proposto neste trabalho. A escolha desses exemplos que embora hipotéticos mostram de maneira clara e objetiva, por exemplo, a comparação do método proposto neste trabalho com a metodologia tradicionalmente usada em física de reatores.

Capítulo 4

Aplicações para o método proposto

Neste capítulo serão mostrados alguns exemplos de aplicação para a teoria proposta neste trabalho. As análises mostradas neste capítulo atém-se a problemas simples, para que não só o método matemático proposto seja compreendido, mas os métodos diferencial e da perturbação.

O primeiro exemplo trata-se de um exemplo proposto por Williams[44], onde o autor faz um estudo com uma cadeia simples contendo um nuclídeo físsil e um veneno, para um intervalo de tempo de 600 dias, onde o parâmetro integral é a concentração do nuclídeo físsil.

Este exemplo é importante pois mostra uma análise comparativa entre o método direto e perturbado. Em adicional, será mostrado uma comparação do método proposto neste trabalho com os exemplos demonstrados por Williams.

O segundo exemplo trata-se de um reator hipotético rápido [30] que possui um tempo de operação de aproximadamente 320 dias. Este reator é um ótimo exercício para estudantes de física de reatores, pois seus cálculos além de apresentarem resoluções analíticas abrangem vários conceitos utilizados em física de reatores, estes foram os motivos da escolha deste reator.

Foram calculadas as concentrações diretas e adjuntas, do ^{238}U e ^{239}Pu para um instante de tempo de 120 dias e a sensibilidade da produção do ^{239}Pu em relação as seções choque de absorção e captura do ^{238}U no primeiro grupo de

energia.

Na próxima seção foi feita uma breve demonstração da igualdade dos métodos propostos neste trabalho com o método diferencial e da teoria da perturbação generalizada.

4.1 Igualdade entre os métodos

A título de demonstração e a partir de uma cadeia simples, contendo dois núclídeos, será demonstrado analiticamente a concordância dos três métodos citados neste trabalho, para a obtenção do coeficiente de sensibilidade. Considere a seguinte cadeia contendo um núclídeo físsil e um veneno em um grupo de energia

$$N_1 \rightarrow N_2, \quad (4.1)$$

esta cadeia é descrita pelo seguinte grupo de equações ¹,

$$\frac{d}{dt}N_1 = -\sigma_{a1}^1\phi N_1, \quad (4.2)$$

$$\frac{d}{dt}N_2 = \gamma\sigma_{f1}^1\Phi N_1 - (\sigma_{c1}^2\Phi + \lambda)N_2. \quad (4.3)$$

Podemos escrever as equações acima em sua forma matricial como,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\sigma_{a1}^1\phi) & 0 \\ \gamma\sigma_{f1}^1\Phi & -(\Phi\sigma_{c1}^2 + \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

cujas soluções são dadas por

$$N_1(t) = N_{10}e^{-\sigma_{a1}^1\Phi t}, \quad (4.5)$$

$$N_2(t) = N_{20}e^{-(\sigma_{c1}^2\Phi + \lambda)t} + \frac{N_{10}\gamma\sigma_{f1}^1\Phi}{(-\sigma_{c1}^2\Phi - \lambda + \sigma_{a1}^1\Phi)}e^{-(\sigma_{a1}^1\Phi)t - (\sigma_{c1}^2\Phi + \lambda)t}. \quad (4.6)$$

¹Foi usado neste trabalho o seguinte formalismo para denotar as seções de choque a seguinte notação σ_{zy}^x onde, x é o tipo de núclídeo, z é o tipo de seção de choque e y é o grupo de energia.

No método diferencial, o coeficiente de sensibilidade é descrito por,

$$S_k = \frac{\alpha_k}{R} \frac{dR}{d\alpha_k}, \quad (4.7)$$

neste método o parâmetro integral é diferenciado em relação ao dado nuclear, logo, diferenciando o parâmetro integral $R = N_1(t_f) = N_{10}e^{-\sum_g^3 \sigma_{ag}^1 \phi t_f}$ em relação ao dado nuclear $\alpha_k = \sigma_{a1}^1$ obtemos,

$$\frac{dN_1(t_f)}{d\sigma_{a1}^1} = N_{10}e^{-\sum_g^3 \sigma_{ag}^1 \phi t_f} \left\{ -\Phi_1 t_f - \sigma_{a1}^1 t_f \frac{d\Phi_1}{d\sigma_{a1}^1} \right\}, \quad (4.8)$$

sendo Φ dado pelo vínculo de potência

$$\Phi_g = \frac{P}{\gamma \sigma_{f1}^1 N_{10}} = \frac{P}{\gamma (\sigma_{a1}^1 - \sigma_{c1}^1) N_{10}}, \quad (4.9)$$

e $\gamma = 1$,

$$\frac{d\Phi}{d\sigma_{a1}^1} = -\frac{P}{(\sigma_{a1}^1 - \sigma_{c1}^1)^2 N_{10}} = \frac{-\Phi_1}{(\sigma_{a1}^1 - \sigma_{c1}^1)}, \quad (4.10)$$

a equação para o coeficiente de sensibilidade é dado por

$$S_{\sigma_{a1}^1} = -\frac{\Phi_1 t_f \sigma_{c1}^1 \sigma_{a1}^1}{(\sigma_{a1}^1 - \sigma_{c1}^1)}. \quad (4.11)$$

Para a obtenção do coeficiente de sensibilidade através da teoria da perturbação generalizada faremos uso da equação relatada por Williams [18],

$$S_{\alpha(\hat{r}, E)} = \frac{\alpha}{R} \left\{ \begin{aligned} & \frac{\partial R}{\partial \alpha(r, E)} + \sum_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^+} N^*(\hat{r}, t) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} M_i N(\hat{r}, t) dt + \\ & - \sum_i \left[\Gamma_i^*(\hat{\rho}) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} B_i \psi_i(\hat{\rho}) \right]_{\Omega} + \\ & - \sum_i P_i^* \left[\psi_i(\hat{\rho}) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} \sigma_{\mathbf{f}} N_i(\hat{r}) \right]_{\Omega} \end{aligned} \right\}, \quad (4.12)$$

o primeiro termo da equação refere-se ao decaimento de núclídeos, o segundo termo refere-se aos fenômenos que dizem respeito ao transporte de nêutrons, e o último termo é o vínculo de potência.

A priori como não faremos uso da equação de transporte não utilizaremos

o segundo termo, nos restando o primeiro e o último termo da equação. Dessa maneira fazamos um estudo da eq.(4.12), onde o primeiro termo para $R = N_1(t_f)$ e $\alpha_k = \sigma_{a1}^1$, é escrito da seguinte maneira

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial \alpha(r, E)} + \sum_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}} N^*(\hat{r}, t) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} M_i N(\hat{r}, t) dt = \frac{\partial N_1(t_f)}{\partial \sigma_{a1}^1} + \\ \sum_i \int_0^{t_f} N_1^* \frac{\partial}{\partial \alpha \sigma_{a1}^1} M_i N_1(t_f) dt. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Por sua vez o segundo termo deve ser desprezado pois não estamos considerando a teoria de transporte, então para o terceiro teremos

$$\sum_i P_i^* \left[\psi_i(\hat{\rho}) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} \sigma_{\mathbf{f}} N_i(\hat{r}) \right]_{\Omega} = P^* \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_{a1}^1} \hat{\sigma}_{f1}^1 N_{10} \right], \quad (4.14)$$

onde ψ_1 é a forma do fluxo, neste caso, $\psi_1 = 1$, e $\frac{\partial}{\partial \sigma_{a1}^1} \hat{\sigma}_{f1}^1 = \frac{\partial}{\partial \sigma_{a1}^1} (\sigma_{a1}^1 + \sigma_{c1}^1) = 1$, então reescrevemos a eq.(4.12) como

$$S_{\sigma_{a1}} = \frac{\sigma_{a1}}{N_1(t_f)} \left(\int_0^{t_f} N^* \frac{\partial M}{\partial \sigma_{a1}} N dt - P^* N_{10} \right). \quad (4.15)$$

Para continuar este exercício é necessário a resolução das equações adjuntas para a cadeia dada pela eq.(4.1), que é escrita da seguinte maneira em sua forma adjunta

$$N_2^* \rightarrow N_1^*, \quad (4.16)$$

e as equações adjuntas para a cadeia (4.16)

$$\frac{dN_1^*}{ds} = -\sigma_{a1}^1 \Phi N_1^* + \gamma \sigma_{f1}^1 \Phi N_2^*, \quad (4.17)$$

$$\frac{dN_2^*}{ds} = -(\Phi \sigma_{c1}^2 + \lambda) N_2^*, \quad (4.18)$$

as equações acima podem ser escritas em sua forma matricial convenientemente

como,

$$\frac{d}{ds} \begin{pmatrix} N_1^* \\ N_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\Phi\sigma_{a1}^1) & \gamma\sigma_{f1}^1\Phi \\ 0 & -(\Phi\sigma_{c1}^2 + \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1^* \\ N_2^* \end{pmatrix}, \quad (4.19)$$

onde a matriz M é dada por,

$$M = \begin{pmatrix} -(\sigma_{a1}^1\phi) & 0 \\ \gamma\sigma_{f2}^1\Phi & -(\Phi\sigma_{c1}^2 + \lambda) \end{pmatrix}. \quad (4.20)$$

Resolvendo primeiramente a equação para o a concentração do nuclídeo N_2^* , pois de acordo com a teoria adjunta a cadeia tem sentido contrário

$$N_2^*(t_f) = N_{20}^* e^{-(\Phi\sigma_{c1}^2 + \lambda)(t_f - t)}, \quad (4.21)$$

e resolvendo para N_1^*

$$N_1^*(t_f) = N_{10}^* e^{[-\sigma_{a1}^1\Phi(t_f - t)]} - \frac{\gamma\sigma_{f1}^1\Phi}{(-\sigma_{c1}^2\Phi - \lambda + \sigma_{a1}^1\Phi)} N_{20}^* \times \\ \left(e^{[(\Phi\sigma_{c1}^2 + \lambda)(t_f - t)]} - e^{[(\phi\sigma_{a1}^1)(t_f - t)]} \right). \quad (4.22)$$

Após o cálculo das concentrações adjuntas podemos calcular agora o primeiro termo entre parentêses da eq.(4.15), que chamaremos de I , em um intervalo de tempo de 0 a t_f

$$I = \int_0^{t_f} N^* \frac{\partial M}{\partial \sigma_{a1}} N dt, \quad (4.23)$$

a matriz M deve ser derivada parcialmente em relação a σ_{a1}

$$\frac{\partial M}{\partial \sigma_{a1}} = \Phi \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

temos então I , usando as devidas condições de contorno

$$N_{10} = N(0), \quad (4.25)$$

$$N_{20} = 0, \quad (4.26)$$

$$N_{10}^* = 1, \quad (4.27)$$

$$N_{20}^* = 0, \quad (4.28)$$

$$I = N_1(t_f)\Phi_1 t_f. \quad (4.29)$$

A equação da potência adjunta sob as condições citadas anteriormente é escrita da seguinte maneira,

$$P_i^* = \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} \frac{[N^*[\psi_i R]_{\Omega,E}, N]_V dt}{[\psi_i \sigma_f N_i]_{\Omega,E,V}}. \quad (4.30)$$

Chamando de I^* a integral a ser resolvida

$$I^* = \int_0^{t_f} [N^*[\psi_i R]_{\Omega,E} N]_V dt. \quad (4.31)$$

$$I^* = \int_0^{t_f} \begin{pmatrix} N_1^* & N_2^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sigma_{a1}^1 \Phi & 0 \\ \sigma_{c1}^1 \Phi & -\lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix} dt. \quad (4.32)$$

$$I^* = \int_0^{t_f} (N_1^*[-\sigma_{a1}^1 \phi_1] N_1 + N_2^*[\sigma_{c1}^1 \phi_1] N_1 + N_2^*[-\lambda_2] N_2) dt. \quad (4.33)$$

$$I^* = \int_0^{t_f} \begin{pmatrix} N_1^*[-\sigma_{a1}^1 \phi_1] N_1 + \\ N_2^*[\sigma_{c1}^1 \phi_1] N_1 + \\ N_2^*[-\lambda_2] N_2 \end{pmatrix} dt. \quad (4.34)$$

Usando as condições de

$$N_{10}^* = 1, \quad (4.35)$$

$$N_{10} = N_{10}, \quad (4.36)$$

$$N_{20} = 0, \quad (4.37)$$

$$N_{20}^* = 0, \quad (4.38)$$

$$P^* = \frac{N_1(t_f)\sigma_{a1}^1\Phi_1 t_f}{\sigma_{f1}^1 N_{10}}, \quad (4.39)$$

Resolvendo I e I^* para a eq.(4.15) segue que

$$S_{\sigma_{a1}} = \frac{-\Phi_1 t_f \sigma_{c1}^1 \sigma_{a1}}{(\sigma_{a1}^1 - \sigma_{c1}^1)}. \quad (4.40)$$

A equação acima mostra o coeficiente de sensibilidade obtido através da teoria da perturbação generalizada que é exatamente igual a eq. (4.11) que é a equação para o coeficiente de sensibilidade obtido através do método diferencial, embora tenhamos usado um exemplo simples com uma cadeia contendo apenas dois núclídeos, é fácil demonstrar que ambos os dois métodos vão fornecer os mesmos resultados para o coeficiente de sensibilidade.

Agora considerando uma cadeia com 3 núclídeos e 3 grupos de energia, façamos uma análise algébrica da derivada do parâmetro integral R em relação ao dado nuclear α_k , do método diferencial e da integral do método proposto, o objetivo desta análise é mostrar sob o ponto de vista algébrico a concordância dos métodos.

Considere a seguinte cadeia de decaimento,

$$N_1 \rightarrow N_2 \rightarrow N_3, \quad (4.41)$$

as equações de decaimento para a cadeia acima são escritas como

$$\frac{dN_1}{dt} = - \sum_g^3 \sigma_{ag}^1 \Phi_g N_1, \quad (4.42)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \sum_g^3 \sigma_{cg}^1 N_1 - \lambda_2 N_2, \quad (4.43)$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_2 N_2 - \lambda_3 N_3, \quad (4.44)$$

para facilitar os cálculos usaremos a seguinte notação

$$\Gamma_y^x = \sum_g^3 \sigma_{yg}^1 \Phi, \quad (4.45)$$

onde x é o tipo de nuclídeo, y é o tipo de seção de choque e g o grupo de energia, reescrevendo então as eqs. (4.42), (4.43) e (4.43),

$$\frac{dN_1}{dt} = -\Gamma_a^1 N_1, \quad (4.46)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \Gamma_c^1 N_1 - \lambda_2 N_2, \quad (4.47)$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_2 N_2 - \lambda_3 N_3. \quad (4.48)$$

Resolvendo as eqs.(4.46), (4.47) e (4.48) temos os seguintes resultados

$$N_1(t) = N_{10} e^{-\Gamma_a^1 t}, \quad (4.49)$$

$$N_2(t) = N_{20} e^{-\lambda_2 t} + \frac{N_{10} \Gamma_c^1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)} \left[e^{\lambda_2 t} - e^{\Gamma_a^1 t} \right], \quad (4.50)$$

$$\begin{aligned} N_3 = N_{30} e^{-\lambda_3 t} + \frac{N_{20} \lambda_2}{(\lambda_2 - \lambda_3)} \left[e^{-\lambda_3 t} - e^{-\lambda_2 t} \right] + \frac{N_{10} \Gamma_c^1 \lambda_2}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\lambda_2 - \lambda_3)} \left[e^{-\lambda_3 t} - e^{-\lambda_2 t} \right] + \\ - \frac{N_{10} \Gamma_c^1 \lambda_2}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} \left[e^{-\lambda_3 t} - e^{-\Gamma_a^1 t} \right], \end{aligned} \quad (4.51)$$

escrevendo as eqs.(4.46), (4.47) e (4.48) em sua forma matricial

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Gamma_a^1 & 0 & 0 \\ \Gamma_c^1 & -\lambda_2 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix}, \quad (4.52)$$

onde

$$M = \begin{bmatrix} -\Gamma_a^1 & 0 & 0 \\ \Gamma_c^1 & -\lambda_2 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 \end{bmatrix}. \quad (4.53)$$

De acordo com a teoria adjunta a cadeia dada pela eq.(4.41) tem o seguinte sentido,

$$N_3^* \rightarrow N_2^* \rightarrow N_1^*, \quad (4.54)$$

onde temos o seguinte grupo de equações de decaimento em sua forma adjunta

$$\frac{dN_3^*}{ds} = -\lambda_3 N_3^* \quad (4.55)$$

$$\frac{dN_2^*}{ds} = -\lambda_2 N_2^* + \lambda_2 N_3^* \quad (4.56)$$

$$\frac{dN_1^*}{ds} = -\Gamma_a^1 N_1^* + \Gamma_c^1 N_2^* \quad (4.57)$$

que por sua vez são escritas em sua forma matricial como

$$-\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} N_1^* \\ N_2^* \\ N_3^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\Gamma_a^1 & \Gamma_c^1 & 0 \\ 0 & -\lambda_2 & \lambda_2 \\ 0 & 0 & -\lambda_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} N_1^* \\ N_2^* \\ N_3^* \end{bmatrix}. \quad (4.58)$$

Dada as condições de contorno,

$$\begin{bmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{bmatrix}_0 = \begin{bmatrix} N_{10} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4.59)$$

$$\begin{bmatrix} N_1^* \\ N_2^* \\ N_3^* \end{bmatrix}_{t_f} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad (4.60)$$

as soluções das equações em sua forma adjunta são reescritas da seguinte maneira;

$$N_1^*(s) = \Gamma_c^1 \left[\frac{N_{30}^* \lambda_2}{(\lambda_3 - \lambda_2)} \left(\frac{1}{(\lambda_2 - \Gamma_a^1)} (e^{-\Gamma_a^1 s} - e^{-\lambda_2 s}) - \frac{1}{(\lambda_3 - \Gamma_a^1)} (e^{-\Gamma_a^1 s} - e^{-\lambda_3 s}) \right) \right], \quad (4.61)$$

$$N_2^*(s) = \frac{\lambda_2}{(\lambda_3 - \lambda_2)} (e^{-\lambda_2 s} - e^{-\lambda_3 s}), \quad (4.62)$$

$$N_3^*(s) = e^{-\lambda_3 s}, \quad (4.63)$$

onde;

$$S = tf - t. \quad (4.64)$$

A equação para o coeficiente de sensibilidade no método diferencial para este caso é dada por

$$S_k = \frac{\alpha_k}{R} \frac{\partial R}{\partial \alpha_k}, \quad (4.65)$$

fazendo $R = N_3(t_f)$ e $\alpha_k = \sigma_a^1$,

$$\begin{aligned} \frac{dN_3}{d\sigma_a^1} = & \lambda_2 N_{10} \left[\frac{d\Gamma_c^1}{d\sigma_a^1} \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)} \left(\frac{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)}{(\lambda_2 - \lambda_3)(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} e^{-\lambda_3 t} + \right. \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{(\lambda_2 - \lambda_3)} e^{-\lambda_2 t} + \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} e^{-\Gamma_a^1 t} \right) + \right. \\ & + \frac{d\Gamma_a^1}{d\sigma_a^1} \left(\frac{\Gamma_c^1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\lambda_2 - \lambda_3)} [e^{-\lambda_2 t}] \right. \\ & \left. - \frac{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} [e^{-\lambda_3 t}] + \right. \\ & \left. - \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} \left(\frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)} + \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} \right) [e^{-\Gamma_a^1 t}] \right) + \\ & \left. - \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} [te^{-\Gamma_a^1 t}] \frac{d\Gamma_a^1}{d\sigma_a^1} \Gamma_c^1 \right]. \quad (4.66) \end{aligned}$$

O coeficiente do método proposto é escrito como,

$$S_k = \frac{\alpha_k}{R} \left(\int_0^{t_f} N^* \frac{\partial M}{\partial \alpha_k} N dt \right), \quad (4.67)$$

onde a matriz M é escrita como,

$$\frac{\partial M}{\partial \sigma_{ag}^1} = \phi \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.68)$$

Chamando de I os termos a serem resolvidos da forma matricial temos,

$$I = \phi \int_0^{t_f} \begin{pmatrix} N_1^* & N_2^* & N_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \end{pmatrix}, \quad (4.69)$$

$$I = \phi \int_0^{t_f} \begin{pmatrix} N_1^* & N_2^* & N_3^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -N_1 \\ N_1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.70)$$

A integral do método proposto é equivalente a derivativa do método diferencial, como será demonstrado a seguir, desse modo escrevemos,

$$\frac{dN_3}{d\sigma_{a1}^1} = \frac{1}{N_3(t_f)} \phi \int_0^{t_f} (N_2^* - N_1^*) N_1 dt, \quad (4.71)$$

resolvendo a integral da equação acima teremos

$$\begin{aligned} \int_0^{t_f} (N_2^* - N_1^*) N_1 dt &= \lambda_2 N_{10} \left[\frac{d\Gamma_c^1}{d\sigma_a^1} \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)} \left(\frac{(\Gamma_a^1 - \lambda_2) 1}{(\lambda_2 - \lambda_3) (\Gamma_a^1 - \lambda_3)} e^{-\lambda_3 t} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{(\lambda_2 - \lambda_3)} e^{-\lambda_2 t} + \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} e^{-\Gamma_a^1 t} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{d\Gamma_a^1}{d\sigma_a^1} \left(\frac{\Gamma_c^1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2) (\Gamma_a^1 - \lambda_2) (\lambda_2 - \lambda_3)} [e^{-\lambda_2 t}] \right) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} [e^{-\lambda_3 t}] + \\
& -\frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} \left(\frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)} + \frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} \right) [e^{-\Gamma_a^1 t}] + \\
& -\frac{1}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} [te^{-\Gamma_a^1 t}] \frac{d\Gamma_a^1}{d\sigma_a^1} \Gamma_c^1.
\end{aligned} \tag{4.72}$$

Após uma álgebra cuidadosa as pode-se notar que as eqs.(4.66) e (4.72) são idênticas. Na próxima secção serão mostrados os exemplos propostos por Williams [18].

4.2 Estudo de Casos

Williams, utilizando aproximação quase -estática, assumiu um meio infinito, tornando assim a equação de difusão independente do espaço, propôs dois exemplos. No primeiro exemplo determinou a sensibilidade da concentração do nuclídeo em um instante T_f , usando apenas um nuclídeo e um grupo de energia, depois usando a teoria de dois grupos também em um meio homogêneo, para uma cadeia simples contendo um nuclídeo combustível e um veneno, observou uma pequena variação na concentração inicial do veneno para um intervalo de tempo de 600 dias, considerando um passo de queima.

Considerando o primeiro exemplo, para uma cadeia contendo um nuclídeo, em um meio infinito e o fluxo descrito em um grupo de energia, e assumindo um único passo de queima, Williams calculou a sensibilidade da concentração do nuclídeo em um intervalo de tempo final T_f , para uma mudança a partir de um tempo inicial igual a zero.

Deste modo as equações de queima para este exemplo são dadas por,

$$N_0(\sigma_a - \lambda\nu\sigma_f)\psi_0 = 0, \tag{4.73}$$

$$\psi_0 N_0 \Phi_0 \sigma_f = P, \tag{4.74}$$

$$\frac{dN}{dt} = -\sigma_a \Phi_0 N, \quad (4.75)$$

$$N(0) \equiv N_0. \quad (4.76)$$

onde (4.73) é a equação do fluxo de nêutrons, (4.74) é a equação da normalização do fluxo, (4.75) é a equação de transmutação e (4.76) são as condições iniciais.

O problema impõe que $\lambda = 1/k_\infty$, seja independentemente de N ou ψ , uma vez que

$$\lambda = \frac{1}{k_\infty} = \frac{\sigma_a}{\nu \sigma_f}. \quad (4.77)$$

De acordo com a condição de normalização $\psi_0 = 1$ a eq.(4.74), pode ser escrita como,

$$\Phi_0 = \frac{P}{N_0 \sigma_f}. \quad (4.78)$$

E da solução de (4.75) temos,

$$N(t) = N_0 \exp(-\sigma_a \Phi_0 t) = N_0 \exp\left(-\frac{\sigma_a P t}{N_0 \sigma_f}\right). \quad (4.79)$$

Para este exemplo assumimos o parâmetro integral definido como a concentração do nuclídeo N no instante T_f (instante final de resposta do nuclídeo),

$$R \equiv N(t_f) \equiv N_0 \exp(-\sigma_a \Phi_0 T_f). \quad (4.80)$$

Realizando uma perturbação na condição inicial,

$$N_0 \mapsto N_0 + \Delta N_0, \quad (4.81)$$

(4.78), (4.79), (4.80), variam do seguinte modo,

$$\phi \mapsto \frac{P}{(N_0 + \Delta N_0) \sigma_f}, \quad (4.82)$$

$$N(t) \mapsto N(t) + \Delta N(t) = (N_0 + \Delta N_0) \exp\left[-\frac{\sigma_a P t}{(N_0 + \Delta N_0) \sigma_f}\right], \quad (4.83)$$

$$R \mapsto R + \Delta R = (N_0 + \Delta N_0) [\exp(-\sigma_a \Phi_0 T_f)] \times [\exp(-\sigma_a \Delta \Phi_0 T_f)]. \quad (4.84)$$

Se assumirmos o formalismo acoplado, ou seja, $\Delta \Phi_0 = 0$, para a concentração de núclídeos e o fluxo de nêutrons de forma que a perturbação em N_0 não influencie a Φ_0 , a eq.(4.84) é escrita como,

$$\Delta R = \Delta N_0 \exp(-\sigma_a \Phi_0 t), \quad (4.85)$$

dividindo (4.85) por (4.80), obtemos

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\Delta N_0}{N_0}. \quad (4.86)$$

Observe que, para o caso desacoplado, o valor do coeficiente de sensibilidade é 1, neste problema em particular.

Considerando, agora, o acoplamento com o fluxo, o efeito da perturbação do fluxo (3.35), será

$$\Delta \Phi = \frac{\delta \Phi_0}{\delta N_0} \delta N_0 = \frac{P}{N_0 \sigma_f} \frac{\delta N_0}{N_0}, \quad (4.87)$$

logo podemos escrever

$$\Delta \Phi_0 \approx -\Phi_0 \frac{\Delta N_0}{N_0}. \quad (4.88)$$

Com isso pode (4.2) pode ser escrita como,

$$R + \Delta R = (N_0 + \Delta N_0) [\exp(-\sigma_a \Phi_0 T_f)] \times \left[\exp \left(\sigma_a \Phi_0 \frac{\Delta N_0}{N_0} T_f \right) \right], \quad (4.89)$$

expandindo o último termo da equação acima em série e desprezando os termos de ordens superiores obtemos,

$$\Delta R = \Delta N_0 [\exp(-\sigma_a \Phi_0 T_f) + T_f \sigma_a \Phi_0 \exp(-\sigma_a \Phi_0 T_f)], \quad (4.90)$$

e dividindo a equação acima por (4.80), obtemos finalmente que

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{\Delta N_0}{N_0}(1 + T_f \sigma_a \Phi_0). \quad (4.91)$$

Onde o termo entre parentêses é o próprio coeficiente de sensibilidade. Comparando (4.2) e (4.91) concluimos que este termo acopla o fluxo e a concentração de núclídeos.

Considerando agora o método adjunto, a equação para núclídeo adjunto é dado por

$$-\frac{dN^*}{dt} = -\sigma_a \Phi_0 N^*, \quad t < T_f, \quad (4.92)$$

com

$$N^*(T_f) = \frac{\partial R}{\partial N} = 1, \quad t = T_f. \quad (4.93)$$

A solução para a concentração adjunta é dada por

$$N^*(t) = \exp[-\sigma_a \Phi_0(T_f - t)]. \quad (4.94)$$

O valor para a normalização do fluxo adjunto e do coeficiente de sensibilidade são dados respectivamente por

$$P_i^* = \frac{\int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} [N^*[\psi_i R]_{\Omega, E}]_V dt + \frac{\partial R}{\partial \Phi_i}}{[\psi_i \sigma_f N_i]_{\Omega, E, V}}, \text{ em } t = t_i, \quad (4.95)$$

$$S_0^m = N_0^m \{N_0^{m*} - [\Gamma_0^* \beta_0^m + P_0^* \Pi_0^m]_{\Omega, E}\}. \quad (4.96)$$

$\Gamma_0^* = 0$, e de acordo com a condição de ortogonalidade e em $t = 0$, $\partial R / \partial \Phi_i = 0$, neste caso a normalização do fluxo adjunto é dada por,

$$P^* = \frac{\int_0^{T_f} N^*(-\sigma_a) N dt}{\sigma_f N_0} = -\frac{\sigma_a N(T_f) T_f}{\sigma_f N_0}, \quad (4.97)$$

e o valor de Π é

$$\Pi_0 = \Phi_0 \sigma_f. \quad (4.98)$$

Substituindo (4.94), (4.97) e (4.98) em (4.97) teremos

$$S_0 = (1 + T_f \sigma_a \Phi_0). \quad (4.99)$$

Que é o mesmo resultado obtido para o método perturbado, podemos concluir então que o método adjunto acoplado estima o efeito do acoplamento não linear entre o fluxo e a concentração de núclídeos que não é apresentado no caso desacoplado.

Se o acoplamento entre a concentração de núclídeo e o fluxo de nêutrons for ignorado, então o coeficiente de sensibilidade se reduz ao caso desacoplamento.

A equação para a obtenção do método proposto é dada por (3.31), fazendo $R = N_i$ para o exemplo citado por Williams temos,

$$S_0 = \frac{\sigma_{a1}}{N_1(t)} \int_0^{t_f} N_1^*(t) \frac{\partial M}{\partial \sigma_{a1}} N_1(t) dt, \quad (4.100)$$

sendo

$$N(t) = N_0 \exp(-\sigma_a \Phi_0 t), \quad (4.101)$$

$$N_1^*(t) = \exp(-\sigma_a \Phi_0 T_f - t), \quad (4.102)$$

$$N_2^*(t) = 0. \quad (4.103)$$

$$M = -\sigma_{a1} \Phi_0, \quad (4.104)$$

Substituindo as eqs.(4.101), (4.102) e (4.104) em (4.100) e fazendo as devidas operações algébricas, temos o coeficiente de sensibilidade para o exemplo citado por Williams, que é exatamente o mesmo coeficiente obtido pelo método diferencial e pelo método da teoria da perturbação,

$$S_0 = (1 + T_f \sigma_a \Phi_0). \quad (4.105)$$

Williams em [44] propôs um outro exercício de aplicação, para uma cadeia

contendo dois núclídeos, sendo um físsil e um veneno, em um meio infinito e usando a teoria de dois grupos, podemos escrever as equações de queima na forma matricial, então teremos para a equação de forma do fluxo

$$\begin{pmatrix} N_1(t)\sigma_{r1}^1 & 0 \\ -N_1(t)\sigma_{s1\rightarrow 2}^1 & N_1(t)\sigma_{a2}^1 + N_2(t)\sigma_{c2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 0 & \nu\sigma_{f2}^1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (4.106)$$

onde, r é a seção de choque de remoção, a é a seção de choque de captura, c é a seção de choque de captura, f é a seção de choque de fissão, s é a seção de choque de espalhamento, $N_1(t)$ é a concentração do combustível e $N_2(t)$ é a concentração do veneno.

Dividindo a eq.(4.106) por $N_1(t)$, obtemos

$$\begin{pmatrix} \sigma_{r1}^1 & 0 \\ -\sigma_{s1\rightarrow 2}^1 & \sigma_{a2}^1 + \varepsilon(t)\sigma_{c2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 0 & \nu\sigma_{f2}^1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (4.107)$$

onde $\varepsilon(t) = \frac{N_2(t)}{N_1(t)}$ e segue daí que,

$$\frac{\psi_1}{\psi_2} = \frac{[\sigma_{a2}^1 + \varepsilon(t)\sigma_{c2}^2]}{(\nu\sigma_{f2}^1)(\sigma_{s1\rightarrow 2}^1)}, \quad (4.108)$$

$$\lambda = \frac{\sigma_{r1}^1[\sigma_{a2}^1 + \varepsilon(t)\sigma_{c2}^2]}{(\nu\sigma_{f2}^1)(\sigma_{s1\rightarrow 2}^1)}. \quad (4.109)$$

A equação de normalização do fluxo, pode ser escrita, neste caso, como

$$\phi = \frac{P}{N_1\sigma_{f2}^1\psi_2}. \quad (4.110)$$

E as equações de transmutação são escritas em sua forma matricial como

$$\begin{pmatrix} -(\sigma_{a1}^1\psi_1 + \sigma_{a2}^1\psi_2)\Phi & 0 \\ \nu\sigma_{f2}^1\psi_2\Phi & -(\Phi\sigma_{c2}^2\psi_2 + \Lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix} = \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \end{pmatrix}, \quad (4.111)$$

onde, ν é o número de nêutrons por fissão para o núclídeo 2 e Λ é a constante

de decaimento do nuclídeo 2.

As soluções para o sistema acima são dadas por,

$$N_1(t) = N_1(0)\exp(-a_{11}t), \quad (4.112)$$

$$N_2(t) = N_2(0)\exp(-a_{22}t) + \frac{N_1(0)a_{21}}{a_{22} - a_{21}} \times [\exp(-a_{11}t) - \exp(-a_{22}t)]. \quad (4.113)$$

onde a_{ij} se refere aos elementos da matriz quadrada dada pela eq.(4.111).

A equação para a concentração adjunta é obtida pela transposição da matriz dada por (4.111), as soluções para as concentrações adjuntas são escritas por;

$$\begin{aligned} N_1^*(t) &= N_1^*(T_f)\exp[-a_{11}(T_f - t)] - \frac{a_{21}}{a_{22}a_{11}}N^*(T_f) \\ &\times \{\exp[-a_{22}(T_f - t)] - \exp[-a_{11}(T_f - t)]\}, \end{aligned} \quad (4.114)$$

$$N_2^*(t) = N_2^*(T_f)\exp[-a_{22}(T_f - t)]. \quad (4.115)$$

O valor para normalização do fluxo adjunto é dado por [44],

$$P^* = \frac{\int_0^{T_f} \{N_1^*(t)a_{11}N_1(t) + N_2^*(t)a_{21}N_1(t) + N_2^*(t)a_{22}N_2^*(t)dt\}}{\psi_2\sigma_{f2}^1}. \quad (4.116)$$

A fonte adjunta é dada por [44],

$$Q_i^*(\hat{\rho}) = \frac{\partial R}{\partial \psi} + \phi_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} N^*(r, t)R(\sigma)N(r, t)dt - \Phi_i P_i^* \sigma_f N_i - a_i. \quad (4.117)$$

A equação da forma do fluxo é dada pela transposição da matriz dada por (4.111), igualando a equação acima a (4.111), obtemos

$$\begin{pmatrix} \sigma_{r1}^1 & -\sigma_{s1 \rightarrow 2}^1 \\ 0 & \sigma_{a2}^1 + \varepsilon(t)\sigma_{c2}^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma_1^* \\ \Gamma_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Q_1^* \\ Q_2^* \end{pmatrix}, \quad (4.118)$$

como

$$Q_1^* = \Phi \int_0^{T_f} dt N_1^*(t)(-\sigma_{a1}^1)N_1(t), \quad (4.119)$$

$$Q_2^* = \Phi \int_0^{T_f} dt [N_1^*(t)(-\sigma_{a2}^1)N_1(t) + N_2^*(t)(\nu\sigma_{f2}^1)N_1(t) + N_2^*(t)(\sigma_{c2}^2)N_2(t)] + \quad (4.120)$$

$$- \Phi P^* N_1(0) \sigma_{f2}^1. \quad (4.121)$$

As expressões acima podem ser resolvidas analiticamente usando (4.110), (4.111) e (4.112).

Os valores escolhidos para os dados de seções de choque, espectro de fissão, potência e decaimento são apresentados na Tabela 4.1, salientando que estes valores foram obtidos em [44] (o nosso caso de referência).

A Tabela 4.2 mostra os resultados dos cálculos para o exemplo 2 no caso referência e no caso perturbado, na Tabela 4.3 apresentamos os resultados para o método adjunto.

Tabela 4.1: Valores hipotéticos para os dados do exemplo 2.

Parâmetro	Valores
σ_{r1}^1	9 barn
σ_{c1}^1	3 barn
$\sigma_{s1 \rightarrow 2}^1$	6 barn
σ_{c2}^1	1 barn
σ_{a2}^1	2 barn
σ_{f2}^1	1 barn
σ_{c2}^2	10 barn
χ_1	1
χ_2	0
γ	0.5
P	2×10^{14} fissões/s.cm ³
Λ	4×10^{-9} s ⁻¹

Tabela 4.2: Resultados para os cálculos do exemplo 2 usando a teoria da perturbação.

	Caso Referência		Caso Perturbado	
	$t = 0$	$t = 600$ dias	$t = 0$	$t = 600$ dias
N_1	1×10^{24}	0.96937×10^{24}	1.0×10^{24}	0.96438×10^{24}
N_2	0	0.17533×10^{23}	0.10×10^{24}	0.95125×10^{23}
$\Phi.\psi_1$	0.6667×10^{24}	0.74992×10^{14}	0.1000×10^{15}	0.10323×10^{15}
$\Phi.\psi_2$	0.2000×10^{15}	0.20632×10^{15}	0.2000×10^{15}	0.20739×10^{15}
k_{eff}	1.500	1.380	1.000	1.005

Tabela 4.3: *Resultados dos cálculos do exemplo 2 para o método adjunto.*

	$t = 0$	$t = 600$
N_1^*	0.96937	1
N_2^*	0	0
Γ_1^*	5.014×10^{17}	
Γ_2^*	6.7008×10^{21}	
ρ^*	1.5076×10^6	

Estes cálculos podem ser efetuados analiticamente usando os valores de Φ , ψ , e N , e considerando a resposta para a concentração do nuclídeo 1 depois de 600 dias de exposição, admitindo a condição final para o nuclídeo adjunto como;

$$N_1^*(600) = 1, \quad (4.122)$$

$$N_2^*(600) = 0. \quad (4.123)$$

E considerando uma mudança na concentração do nuclídeo combustível devido a uma variação na concentração inicial do veneno, uma mudança na concentração do nuclídeo 2 não afeta diretamente o nuclídeo 1, desde que 1 não seja produzido pelo nuclídeo 2. Podemos assumir também para o veneno que a seção de choque de fissão é nula, não sendo afetado diretamente a normalização do fluxo.

Na segunda coluna da Tabela 4.2 temos os resultados do cálculo diante uma perturbação na condição inicial do veneno de $0.1 \times 10^{24} \text{ atom/cm}^3$, e na coluna 4 observamos um aumento do k_{eff} , o que acontece devido a adição de veneno no espectro, o que aumenta a taxa de depleção do nuclídeo 1, devido a sua seção de choque de absorção que é maior no grupo 1 do que no grupo 2.

No caso da concentração também dada na coluna 4 da Tabela 4.2, observamos que sofreu uma leve mudança perante a perturbação, a variação do parâmetro integral é de cerca de -0.52% .

Podemos prever a variação do parâmetro integral usando a teoria da perturbação generalizada,

$$\Delta N = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.1 \end{pmatrix} \times 10^{24}. \quad (4.124)$$

Dessa forma teremos um $\Delta R/R$ de;

$$\Delta R/R = \frac{-0.1 \times 10^{24}}{0.96937 \times 10^{24}} (\Gamma_2^* \sigma_{c2} \psi_2) = -0.52\%. \quad (4.125)$$

A partir desse resultado vemos que o método da perturbação concorda com o método diferencial.

Apresentamos na Tabela 4.4 os cálculos método diferencial, método da teoria da perturbação generalizada e o método proposto neste trabalho. Note que ambos valores concordam entre si, neste problema em particular, o que é esperado pois os métodos são equivalentes entre si (vale a pena salientar que é esperado uma divergência do método direto em relação aos outros métodos, isso advém do fato que os outros métodos nos fornecem a variação de acordo com uma variação de primeira ordem).

Tabela 4.4: Resultados dos métodos usados dois grupos de energia.

Métodos	S_k
Diferencial	-0.52%
TPG	-0.52%
Proposto	-0.5184%

Na próxima secção será apresentado um problema de aplicação para um reator rápido, onde foram calculadas as concentrações diretas, adjuntas e a sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação a seção de choque de absorção do ^{238}U no primeiro grupo de energia.

4.3 Aplicação do método proposto em um Reator Hipotético

O próximo exemplo trata-se um reator hipotético rápido com geometria cilíndrica e secção quadrada, refrigerado com sódio líquido, enriquecido a 25,6% com ^{235}U [17], a taxa de volume de urânio-sódio é 0.6, com potência de 300MW, a temperatura média do refrigerante é 720^0F e sua densidade é $0.85\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$ em 3 grupos de energia.

Este reator possui uma vida de aproximadamente 320 dias, então vamos considerar para o cálculo um instante de tempo de 100 dias, o que vai nos

permitir observar a cadeia de produção do ^{239}Pu escrita como,;

As densidades usadas para este cálculo para o ^{235}U e ^{238}U respectivamente

$$n_{U^{235}} = 0.256 \times 1.812 \times 10^{-2} = 4.63872 \times 10^{-3} \left[\frac{\text{átomo}}{\text{barn.cm}} \right], \quad (4.127)$$

$$n_{U^{238}} = 0.744 \times 1.812 \times 10^{-2} = 1.348128 \times 10^{-2} \left[\frac{\text{átomo}}{\text{barn.cm}} \right], \quad (4.128)$$

As seções de choque usadas núclídeos principais encontram-se nas Tabelas 4.5 a 4.7 . A taxa de volume urânio-sódio é 0.6, isto quer dizer que no volume total

Tabela 4.5: Seções de choque para o ^{235}U .

Grupo	$\sigma_a[\text{barn}]$	$\sigma_f[\text{barn}]$	$\sigma_c[\text{barn}]$	
1	2.67504×10^{-4}	2.51423×10^{-4}	1.36477×10^{-5}	
2	1.1358×10^{-4}	9.3459×10^{-5}	2.0129×10^{-5}	
3	0.61644	0.43013	0.18312	

Tabela 4.6: Seções de choque para o ^{238}U .

Grupo	$\sigma_a[\text{barn}]$	$\sigma_f[\text{barn}]$	$\sigma_c[\text{barn}]$	
1	8.5459×10^{-5}	6.9359×10^{-5}	1.2994×10^{-5}	
2	1.07513×10^{-5}	3.2538×10^{-8}	1.0718×10^{-5}	
3	5.85986×10^{-2}	6.1718×10^{-6}	5.9593×10^{-2}	

Tabela 4.7: Seções de choque para o ^{239}Pu .

Grupo	$\sigma_a[\text{barn}]$	$\sigma_f[\text{barn}]$	$\sigma_c[\text{barn}]$	
1	3.8467×10^{-4}	3.8134×10^{-4}	2.60660×10^{-6}	
2	1.1963×10^{-4}	1.06441×10^{-4}	1.31917×10^{-5}	
3	0.50771	2.7199×10^{-2}	2.3571×10^{-1}	

da mistura temos 3/8 urânio e 5/8 de sódio , então temos as seguintes frações para estes núclídeos

$$n_{Na} = \frac{0.85 \times 0.6022 \times 10^{24}}{22.9898} \times \frac{5}{8} = 1.39125 \times 10^{-2} \left[\frac{\text{átomo}}{\text{barn.cm}} \right], \quad (4.129)$$

$$n_U = \frac{19.1 \times 0.6022 \times 10^{24}}{238.03} \times \frac{3}{8} = 1.812 \times 10^{-2} \left[\frac{\text{átomo}}{\text{barn.cm}} \right]. \quad (4.130)$$

A cadeia dada pela eq.(4.126) é descrita pelas seguintes equações

$$\frac{dN_1}{dt} = - \sum_{g=1}^4 \sigma_{ag}^1 \phi_g N_1, \quad (4.131)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = - \sum_{g=1}^4 \sigma_{cg}^1 \phi_g N_1 - \lambda_2 N_2, \quad (4.132)$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_2 N_2 - \lambda_3 N_3, \quad (4.133)$$

$$\frac{dN_4}{dt} = \lambda_3 N_3 - \sum_{g=1}^4 \sigma_{ag}^4 \phi_g N_4, \quad (4.134)$$

onde a somatória é feita nos grupos de interesse, a solução das equações diferenciais acima nos fornecem as densidades dos núclídeos.

As soluções das equações de transmutações (4.131), (4.132), (4.133) e (4.134)

$$N_1(t) = N_{10} e^{-\Gamma_a^1 t}, \quad (4.135)$$

$$N_2(t) = N_{20} e^{-\lambda_2 t} + \frac{N_{10} \Gamma_c^2}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)} \left[e^{-\lambda_2 t} - e^{-\Gamma_a^1 t} \right], \quad (4.136)$$

$$\begin{aligned} N_3(t) = N_{30} e^{-\lambda_3 t} + \frac{N_{20} \lambda_2}{(\lambda_2 - \lambda_3)} \left[e^{-\lambda_3 t} - e^{-\lambda_2 t} \right] + \frac{N_{10} \Gamma_c^2 \lambda_2}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\lambda_2 - \lambda_3)} + \\ - \frac{N_{10} \Gamma_c^2 \lambda_2}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\Gamma_a^1 - \lambda_3)} \left[e^{-\lambda_3 t} - e^{-\Gamma_a^1 t} \right] \end{aligned} \quad (4.137)$$

$$\begin{aligned} N_4(t) = N_{40} e^{-\Gamma_a^4 t} + \frac{N_{30} \lambda_3}{(\lambda_3 - \Gamma_a^4 \phi)} \left(-e^{-\lambda_3 t} + e^{-\Gamma_a^4 t} \right) + \\ + \frac{N_{20} \lambda_3 \lambda_3}{(\lambda_2 - \lambda_3)} \left[\frac{1}{(\lambda_3 - \Gamma_a^4)} \left(e^{-\Gamma_a^4 t} - e^{-\lambda_3 t} \right) - \frac{1}{(\lambda_2 - \Gamma_a^4 \phi)} \left(e^{-\Gamma_a^4 t} - e^{-\lambda_2 t} \right) \right] + \\ + \frac{N_{10} \Gamma_c^1 \lambda_2 \lambda_3}{(\Gamma_a^1 - \lambda_2)(\lambda_2 - \lambda_3)} \left[\frac{1}{(\lambda_3 - \Gamma_a^4)} \left(e^{-\Gamma_a^4 t} - e^{-\lambda_3 t} \right) - \frac{1}{(\lambda_2 - \Gamma_a^4)} \left(e^{-\Gamma_a^4 t} - e^{-\lambda_2 t} \right) \right] + \end{aligned}$$

$$-\frac{N_{10}\Gamma_c^1\lambda_2\lambda_3}{(\Gamma_a^1-\lambda_2)(\Gamma_a^1-\lambda_3)}\left[\frac{1}{(\lambda_3-\Gamma_a^4)}\left(e^{-\Gamma_a^4 t}-e^{-\lambda_3 t}\right)+-\frac{1}{(\Gamma_a^4-\Gamma_a^1)}\left(e^{-\Gamma_a^4 t}-e^{-\Gamma_a^1 t}\right)\right] \quad (4.138)$$

Podemos escrever as equações de transmutação deste problema em sua forma matricial como

$$\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma_a^1 & 0 & 0 & 0 \\ \Gamma_c^2 & -\lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & -\Gamma_a^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \end{pmatrix}, \quad (4.139)$$

onde temos que a matriz M é dada por:

$$M = \begin{pmatrix} \Gamma_a^1 - \frac{d}{dt} & 0 & 0 & 0 \\ \Gamma_c^2 & -\lambda_2 - \frac{d}{dt} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 - \frac{d}{dt} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & -\Gamma_a^4 - \frac{d}{dt} \end{pmatrix}. \quad (4.140)$$

As equações acima obedecem as seguintes condições iniciais

$$\begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ N_4 \end{pmatrix}_0 = \begin{pmatrix} N_{10} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.141)$$

Dessa maneira as equações adjuntas são escritas em sua forma matricial como,

$$-\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} N_1^* \\ N_2^* \\ N_3^* \\ N_4^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\Gamma_a^1 & \Gamma_c^2 & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda_2 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_3 & \lambda_3 \\ 0 & 0 & 0 & -\Gamma_a^4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1^* \\ N_2^* \\ N_3^* \\ N_4^* \end{pmatrix}, \quad (4.142)$$

As equações acima obedecem as seguintes condições iniciais

$$\begin{pmatrix} N_1^* \\ N_2^* \\ N_3^* \\ N_4^* \end{pmatrix}_{t=t_f} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (4.143)$$

onde a matriz M^T é a transposta de M . Através das soluções das equações de transmutação é possível obter-se as concentrações.

Nas Figuras 4.1 e 4.2, temos as concentrações diretas e adjuntas do ^{238}U e ^{239}Pu , respectivamente, e nas figuras 4.3 e 4.4 temos a sensibilidade do produção de ^{239}Pu em relação a seção de choque de absorção e captura do ^{238}U no primeiro grupo de energia.

Figura 4.1: Concentrações direta e adjunta para o ^{238}U .

Figura 4.2: Concentrações adjuntas para o ^{239}Pu .

Figura 4.3: Sensibilidade da produção do ^{239}Pu em relação a seção de choque de absorção do ^{238}U no grupo 1.

Figura 4.4: Sensibilidade da produção do ²³⁹Pu em relação a seção de choque de captura do ²³⁸U no grupo 1.

No próximo capítulo o método proposto será aplicado em um reator do tipo PWR, onde foram calculados os coeficientes de sensibilidade da concentração do ²³⁹Pu e da razão de conversão em relação as seções de choque dos núclídeos importantes.

Capítulo 5

Aplicação do Método Proposto em Reatores de Potência

Neste capítulo o método proposto para o cálculo do coeficiente de sensibilidade, será aplicado em um reator PWR [64], semelhante ao reator utilizado na Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto (CNAAB), mais conhecida por usina nuclear de Angra 1.

Este reator é moderado e refrigerado a água leve e opera a uma potência de 600 MWe (1800 MWt), a potência média dissipada por elemento combustível usada neste trabalho foi de $14,8760\text{ MW}$. O combustível encontra-se na forma de óxido de urânio (UO_2) enriquecido a 3%, o elemento combustível possui geometria cilíndrica cujas varetas estão dispostas em um arranjo quadrado de 16×16 , o material do encamisamento é de zircaloy-4, as grades espaçadores são compostas de inconel-718, o vaso de pressão possui forma cilíndrica e espessura de $3,8\text{ cm}$. As análises foram feitas no combustível do tipo 16STD.

Utilizando o método proposto neste trabalho será feita a análise da produção de ^{239}Pu e da razão de conversão como parâmetros integrais e as sensibilidades tomadas em relação às seções de choque dos núclídeos relevantes para a sua produção.

As análises das sensibilidades foram realizadas para 4 grupos de energia, o

sistema é assumido como um meio infinito e refletido e a queima foi realizada em um intervalo de tempo de 120 dias. As seções de choque foram homogeneizadas através do código MCNP5 [65] e a biblioteca utilizada foi a ENDFB/VII, as cadeias de decaimento foram linearizadas pelo código CINEW que foi desenvolvido durante este trabalho.

5.1 Especificações do Combustível

As especificações do combustível escolhido encontram-se nas Tabelas 5.1 a 5.4, onde temos na Tabela 5.1 os dados geométricos da vareta do combustível, na Tabela 5.2 os dados da guia de controle, na Tabela 5.3 os dados do elemento combustível e nas Tabelas 5.4 os dados dos materiais que compõem o elemento combustível e a Figura 5.1, mostra o desenho esquemático de Angra 1.

Tabela 5.1: *Dados da vareta do combustível da usina Angra de 1.*

Vareta do Combustível	Combustível (16STD)
Material	UO_2
Densidade da pastilha de UO_2 (g/cm^3)	10,40
Concavidade (%)	2,16128
Enriquecimento de ^{235}U na pastilha de UO_2 (%)	4,2
Diâmetro da pastilha (cm)	0,805
Material do encamisamento	<i>Zircaloy</i> – 4
Diâmetro Interno do Encamisamento (cm)	0,822
Diâmetro Externo do Encamisamento (cm)	0,95

Tabela 5.2: *Dados da Guia de controle da usina Angra 1.*

Guia de Controle e Instrumentação	
Material	Zircaloy-4
Diâmetro interno (cm)	1,105
Diâmetro externo (cm)	1,196

Tabela 5.3: Dados do elemento combustível da usina Angra 1.

Elemento Combustível	
Passo da rede (quadrada) (cm)	1,232
Arranjo	16 × 16
Número de varetas combustíveis: ECs sem VQ	235
Número de tubos guias de controle	20
Diâmetro da pastilha (cm)	1
Número de tubos guias de instrumentação	Zircaloy – 4
Altura ativa do combustível (cm)	365,8

Tabela 5.4: Dados do Urânio.

Urânio	fração	Massa Molar
^{234}U	$5,8431 \times 10^{-6}$	234,0409521
^{235}U	$6,8931 \times 10^{-4}$	235,0439299
^{238}U	2.2282×10^{-2}	238,0507882

Figura 5.1: Diagrama esquemático do elemento combustível de Angra 1.

5.2 Produção de ^{239}Pu

Dentro de toda a esquemática de cadeias de produção ^{239}Pu existem três caminhos distintos que levam a formação do ^{239}Pu , os quais são:

1. Através do ramo onde o ^{239}U decai por β em ^{239}Np ;
2. Através do ramo de decaimento- β do ^{237}U ;
3. E através do ramo pelo decaimento- β do ^{238}Np .

A Figura 5.2 mostra as principais cadeias de produção do ^{239}Pu , onde na parte inferior da figura temos as cadeias em sua forma linearizada. Nas tabelas 5.5 a 5.9 são apresentadas as seções de choque utilizadas nos cálculos do reator escolhido.

Figura 5.2: Cadeia de produção do ^{239}Pu .

Tabela 5.5: Seções de choque para o ^{235}U .

^{235}U			
Grupo	σ_a [barn]	σ_f [barn]	σ_c [barn]
1	1,38732	1,2377	$1,4213 \times 10^{-1}$
2	3,12478	2,3327	$7,9210 \times 10^{-1}$
3	$3,6735 \times 10^1$	$2,4332 \times 10^1$	$1,2404 \times 10^1$
4	$3,7887 \times 10^2$	$3,2297 \times 10^2$	$5,5899 \times 10^1$

Tabela 5.6: *Seções de choque para o ^{238}U .*

^{238}U			
<i>Grupo</i>	σ_a [barn]	σ_f [barn]	σ_c [barn]
1	$2,9605 \times 10^{-1}$	$1,9749 \times 10^{-1}$	$8,9013 \times 10^{-2}$
2	$4,6795 \times 10^{-1}$	$7,2467 \times 10^{-5}$	$4,6788 \times 10^{-1}$
3	2,0760	$1,9712 \times 10^{-4}$	2,0759
4	1,6074	$1,0018 \times 10^{-5}$	1,6074

Tabela 5.7: *Seções de choque para o ^{239}U .*

^{239}U			
<i>Grupo</i>	σ_a [barn]	σ_f [barn]	σ_c [barn]
1	$5,8435 \times 10^{-1}$	$4,1185 \times 10^{-1}$	$1,3319 \times 10^{-1}$
2	1,7404	$7,7093 \times 10^{-1}$	$9,6945 \times 10^{-1}$
3	$2,5585 \times 10^1$	$5,8197 \times 10^{-1}$	$2,5003 \times 10^1$
4	$4,8643 \times 10^1$	$2,0229 \times 10^1$	$2,8413 \times 10^1$

Tabela 5.8: Seções de choque para o ^{238}Pu .

^{238}Pu			
Grupo	σ_a [barn]	σ_f [barn]	σ_c [barn]
1	$2,1778 \times 10^{-1}$	0,0000	$2,1502 \times 10^{-1}$
2	1,0589	0,0000	1,0588
3	$1,5238 \times 10^1$	0,0000	$1,5238 \times 10^1$
4	$2,7266 \times 10^2$	0,0000	$2,7267 \times 10^2$

Tabela 5.9: Seções de choque para o ^{239}Pu .

^{239}Pu			
Grupo	σ_a [barn]	σ_f [barn]	σ_c [barn]
1	1,7918	1,7143	$7,5268 \times 10^{-2}$
2	2,4479	1,7173	1,0588
3	$4,4666 \times 10^1$	$2,6941 \times 10^1$	$1,7725 \times 10^1$
4	$1,1724 \times 10^3$	$7,6724 \times 10^2$	$4,0514 \times 10^2$

Em uma análise inicial pode-se pressupor que dentre as cadeias de produção do ^{239}Pu a mais relevante é através do decaimento do ^{239}U , uma vez que este advém da captura de um nêutron pelo ^{238}U que, por sua vez, é o nuclídeo presente no material combustível em maior abundância e cuja seção de choque de captura não pode ser negligenciada.

Os outros dois ramos das cadeias devem possuir menor relevância uma vez que advém da formação através do ^{235}U , que além de ser quase duas ordens de grandeza menos abundante que o ^{238}U ainda necessita capturar várias vezes consecutivas para formar os elementos no centro das duas cadeias restantes e cujas seções de choque de captura não são tão expressivas.

A análise da cadeia mostrou que a principal maneira de produção do ^{239}Pu é através da captura de um nêutrons pelo ^{237}U e formação do ^{238}U , sendo que o ^{238}U estando presente no combustível contribui diretamente para a formar ^{239}Pu .

Agora será feita a análise das concentrações adjuntas dos nuclídeos envolvidos na cadeia considerando a contribuição de todas as cadeias calculadas pelo CINEW.

Gandini [66], definiu o conceito de "importância" através da teoria adjunta, no caso desta análise a concentração adjunta é a "importância" definida do mesmo modo. Utilizaremos a teoria proposta para os cálculos das concentrações adjuntas dos núclídeos envolvidos na análise, onde o vetor realização será igual a 1 para a posição do ^{239}Pu que é o núclídeo de interesse ou núclídeo alvo e 0 para os demais, lembrando que no cálculo da concentração adjunta a condição de partida é o tempo final t_f de irradiação.

Nas Figuras 5.3-5.8 são apresentadas as as concentrações diretas e adjuntas para os núclídeos ^{235}U , ^{237}U , ^{238}U , ^{239}U , ^{239}Np e ^{239}Pu respectivamente. Ne-las podenos notar que os valores máximos atingidos pela função importância decrescem conforme se afastam do núclídeo alvo, a saber, o ^{239}Pu . Isto se dá pelo fato de que a importância transita em ordem inversa na cadeia seguindo as taxas alteradas pela transposição da matriz M . Isto realça a realidade física evidente de que os núclídeos formadores mais próximos do núclídeo alvo contribuem fortemente para a sua formação.

Já a forma da função importância sugere que os instantes de tempo dentro do período considerado no qual o determinado núclídeo exerce maior importância na formação do ^{239}Pu , cujos valores são uma composição das amplitudes das densidades dos núclídeos na cadeias somadas com seu acoplamento e instante de tempo. Pode-se ver isto claramente na Figura 5.3, onde nota-se o decréscimo da função importância juntamente com o decréscimo ocasionado pelo consumo do ^{235}U no decorrer do tempo. A não linearidade da função importância esta relacionada com o acoplamento das cadeias inversas de importância e a baixa amplitude com a distância do núclídeo do núclídeo alvo na cadeia.

Figura 5.3: Concentrações diretas e adjuntas do ^{235}U .

Figura 5.4: Concentrações diretas e adjuntas do ^{237}U .

Figura 5.5: Concentrações diretas e adjuntas para o ^{238}U .

Figura 5.6: Concentrações diretas e adjuntas para o ^{239}U .

Figura 5.7: Concentrações diretas e adjuntas para o ^{239}Np .

Figura 5.8: Concentrações diretas e adjuntas para o ^{239}Pu .

A análise da forma da função adjunta dos demais elementos apresentados seguem o mesmo raciocínio, exceto para a Figura 5.8 onde temos o ^{239}Pu , que é o nuclídeo de interesse, onde nas redondezas de t_f a concentração adjunta decresce linearmente, enquanto a concentração direta vai aumentando devido a sua formação, o comportamento inverso apresentado pelos demais nuclídeos e que advém da construção do modelo.

Lembrando que o estudo das concentrações adjuntas nos fornecem os nuclídeos importantes para a produção de um determinado nuclídeo alvo. Em teoria adjunta, a análise é feita na cadeia de interesse a partir do último nuclídeo da cadeia.

As concentrações mostradas anteriormente foram calculadas pelo código CINEW que foi desenvolvido durante este trabalho e os resultados obtidos pelo CINEW foram verificados através da comparação direta com os resultados obtidos pelo código CINDER [38], algumas dessas comparações são mostradas nas Figuras 5.9, 5.10 e 5.11, juntamente com as Tabelas 5.10, 5.11, 5.12 e evidenciam que as concentrações obtidas por ambos os códigos para um período de queima de 120 dias apresentaram valores próximos.

A diferença destes cálculos, embora pequenas, podem ser explicadas devido a elementos computacionais oriundos de diversos truncamentos realizados pelo CINDER que não são adotados pelo CINEW.

Figura 5.9: Concentrações para o ^{235}U calculadas pelo CINDER e pelo CINEW.

Figura 5.10: Concentrações para o ^{238}U calculadas pelo CINDER e pelo CINEW.

Figura 5.11: Concentrações para o ^{239}Pu calculadas pelo CINDER e pelo CINEW.

Tabela 5.10: Valores obtidos pelo CINDER e pelo CINEW para o ^{235}U .

^{235}U		
tempo[dias]	CINDER	CINEW
1	$6,88265 \times 10^{-4}$	$6,88265 \times 10^{-4}$
2	$6,87225 \times 10^{-4}$	$6,87225 \times 10^{-4}$
5	$6,84113 \times 10^{-4}$	$6,84113 \times 10^{-4}$
10	$6,78957 \times 10^{-4}$	$6,78958 \times 10^{-4}$
20	$6,68764 \times 10^{-4}$	$6,68764 \times 10^{-4}$
30	$6,58723 \times 10^{-4}$	$6,58724 \times 10^{-4}$
40	$6,48833 \times 10^{-4}$	$6,48835 \times 10^{-4}$
50	$6,39093 \times 10^{-4}$	$6,39095 \times 10^{-4}$
60	$6,29499 \times 10^{-4}$	$6,29501 \times 10^{-4}$
90	$6,01573 \times 10^{-4}$	$6,01577 \times 10^{-4}$
120	$5,74889 \times 10^{-4}$	$5,74894 \times 10^{-4}$

Tabela 5.11: Valores obtidos pelo CINDER e pelo CINEW para o ^{238}U .

^{238}U		
<i>tempo[dias]</i>	<i>CINDER</i>	<i>CINEW</i>
1	$2,22811 \times 10^{-2}$	$2,22811 \times 10^{-2}$
2	$2,22805 \times 10^{-2}$	$2,22805 \times 10^{-2}$
5	$2,22787 \times 10^{-2}$	$2,22787 \times 10^{-2}$
10	$2,22757 \times 10^{-2}$	$2,22757 \times 10^{-2}$
20	$2,22696 \times 10^{-2}$	$2,22696 \times 10^{-2}$
30	$2,22636 \times 10^{-2}$	$2,22636 \times 10^{-2}$
40	$2,22575 \times 10^{-2}$	$2,22575 \times 10^{-2}$
50	$2,22515 \times 10^{-2}$	$2,22515 \times 10^{-2}$
60	$2,22455 \times 10^{-2}$	$2,22455 \times 10^{-2}$
90	$2,22274 \times 10^{-2}$	$2,22274 \times 10^{-2}$
120	$2,22093 \times 10^{-2}$	$2,22093 \times 10^{-2}$

Tabela 5.12: Valores obtidos pelo CINDER e pelo CINEW para o ^{239}Pu .

^{239}Pu		
<i>tempo[dias]</i>	<i>CINDER</i>	<i>CINEW</i>
1	$7,32891 \times 10^{-8}$	$7,32898 \times 10^{-8}$
2	$2,73544 \times 10^{-7}$	$2,73551 \times 10^{-7}$
5	$3,81420 \times 10^{-6}$	$3,81459 \times 10^{-6}$
10	$9,18101 \times 10^{-6}$	$9,18231 \times 10^{-6}$
20	$1,44202 \times 10^{-5}$	$1,44225 \times 10^{-5}$
30	$1,94521 \times 10^{-5}$	$1,94553 \times 10^{-5}$
40	$2,42804 \times 10^{-5}$	$2,42847 \times 10^{-5}$
50	$2,89133 \times 10^{-5}$	$2,89186 \times 10^{-5}$
60	$4,17157 \times 10^{-5}$	$4,17240 \times 10^{-5}$
90	$4,17157 \times 10^{-5}$	$4,17240 \times 10^{-5}$
120	$5,30230 \times 10^{-5}$	$5,30342 \times 10^{-5}$

Na próxima secção será feita a análise da concentração do ^{239}Pu como parâmetro integral e as seções de choque dos nuclídeos de interesse em 4 grupos de energia como dado nuclear.

5.3 Sensibilidade da produção do ^{239}Pu em relação aos nuclídeos de interesse

Como mostrado na secção anterior, o principal meio de produção do ^{239}Pu é através do ramo do ^{239}U , então é natural supor que os nuclídeos de interesse para o estudo das sensibilidades envolvidas devem ser os urânios ^{235}U e ^{238}U ,

que fazem parte do material do combustível e possuem concentrações relevantes.

A obtenção dos coeficientes de sensibilidade para a concentração do ^{239}Pu em relação ao dado nuclear básico, que no caso, são as seções de choque dos núclídeos de interesse, foram calculados pelo programa CINEW utilizando em 4 grupos de energia.

Nas Figuras 5.12-5.15 estão apresentados os resultados obtidos para os coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação às seções de choque do ^{235}U para os quatro grupos de energia considerados.

Figura 5.12: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 1.

Figura 5.13: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 2.

Figura 5.14: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 3.

Figura 5.15: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{235}U no grupo 4.

Consecutivamente nas Figuras 5.16-5.19 estão apresentados os resultados obtidos para os coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação às seções de choque do ^{238}U para os quatro grupos de energia considerados.

Figura 5.16: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 1.

Figura 5.17: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 2.

Figura 5.18: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 3.

Figura 5.19: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{238}U no grupo 4.

As Figuras 5.20 a 5.23 apresentam a sensibilidade em relação a seção de choque do ^{239}U , para os 4 grupos de energia respectivamente, no caso do ^{239}U as seções de choque de fissão e captura possuem valores negativos, isto acontece porque o ^{239}U contribui para a formação do ^{239}Pu através do decaimento- β .

Figura 5.20: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 1.

Figura 5.21: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 2.

Figura 5.22: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 3.

Figura 5.23: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}U no grupo 4.

Como vimos na secção anterior, a concentração adjunta do ^{239}Np possui uma importância que deve ser considerada, sendo que este nuclídeo também

apresenta sensibilidades negativas em relação as seções de choque de fissão e captura, como o seu antecessor, o ^{239}U é importante para a formação do ^{239}Pu , através do decaimento- β , neste trabalho será apresentado a sensibilidade do ^{239}Np apenas para o grupo 3, dada pela Figura 5.24, os demais grupos apresentam sensibilidades com magnitudes pequenas o suficiente para serem desconsideradas.

Figura 5.24: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Np no grupo 3.

Finalmente fazendo um estudo das sensibilidades em relação aos ^{238}Pu e ^{239}Pu , o resultado obtido em relação ao ^{238}Pu foram sensibilidades pequenas que foram desconsideradas neste trabalho, o que era esperado pois o ^{238}Pu não contribui de maneira significativa para a produção de ^{239}Pu .

Nas Figuras 5.25 a 5.28, temos a sensibilidade do ^{239}Pu em relação a sua própria seção de choque, que apresentam sensibilidades negativas, isto mostra que reações de fissão e captura retiram ^{239}Pu da cadeia, pois se este nuclídeo sofrer estas reações irá formar outros nuclídeos.

É importante notar que a amplitude de variação do coeficiente de sensibi-

lidade em relação a distância do nuclídeo alvo analisado, varia conforme os elementos se distanciam do alvo na cadeia. As variações são bastantes sutis no período de tempo analisado.

Figura 5.25: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 1.

Figura 5.26: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 2.

Figura 5.27: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 3.

Figura 5.28: Coeficiente de sensibilidade da concentração do ^{239}Pu em relação ao ^{239}Pu no grupo 4.

A título de verificação foi utilizado o método direto para calcular a sensibilidade da produção de ^{239}Pu em relação a seção de choque de captura do ^{238}U no terceiro grupo de energia. O método direto resume-se em variar a seção de choque envolvida no problema diretamente para a obtenção do coeficiente de sensibilidade, estes resultados estão nas Figuras 5.29 e 5.30. A primeira apresenta os coeficientes de sensibilidade para grupo 3 em função do tempo t_f até o período de 120 dias e a segunda figura mostra um gráfico de barras em um instante de tempo fixo $t_f = 120$ dias.

Nestes resultados, fica evidenciado que a variação relativa entre os métodos foi de no máximo 0,2%, essa variação é satisfatória uma vez que o método direto considera em sua aproximação termos de ordens superiores, somados a variações de natureza numérica, como mostra a Figura 5.29, onde se nota que o erro é, fundamentalmente, sistemático.

Após o estudo da sensibilidade da concentração de ^{239}Pu em relação as seções de choque dos núclídeos de interesse, existe um outro parâmetro integral que

Figura 5.29: Comparação entre o método direto e o método proposto.

Figura 5.30: Erro relativo entre o método direto e o método proposto para a produção de ^{239}Pu .

deve ser analisado que é a razão de conversão que será mostrada na próxima secção.

5.4 Sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U

O termo conversão e razão de conversão podem ser usados para definir a razão entre os átomos fissionáveis gerados pelos átomos fissionáveis consumidos, [67], neste trabalho o termo utilizado será razão de conversão e será definida como,

$$CR = \frac{N^{Pu239}(tf)}{N^{U235}(0) - N^{U235}(tf)}. \quad (5.1)$$

Os resultados da sensibilidade da razão de conversão em relação as seções de choque do ^{238}U são mostrados nas Figuras 5.31 a 5.34, respectivamente, para os quatro os grupos de energia, onde nota-se um comportamento negativo quando o dado nuclear é a seção de choque de fissão. Este resultado mostra que se houver aumento na reação de fissão a razão de conversão irá diminuir.

O ^{238}U apresenta seções de captura altas nos grupos de interesse, que são os grupos 3 e 4, sendo a razão de conversão sensível quando é calculada em relação a este tipo de seção de choque.

Devemos notar que apesar do coeficiente de sensibilidade ser maior para o grupo 3, os resultados mostram uma menor definição para o primeiro grupo de energia uma vez que as incertezas relacionadas a este grupo são maiores.

Figura 5.31: Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 1.

Figura 5.32: Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 2.

Figura 5.33: Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 3.

Figura 5.34: Coeficiente de sensibilidade da razão de conversão em relação ao ^{238}U no grupo 4.

Para verificação, a razão de conversão foi calculada pelo SERPENT [35, 36] e pelo CINEW, os resultados obtidos estão na Tabela 5.13 e na Figura 5.35, os resultados mostram uma variação relativa entre o Serpent e o CINEW de 2.4% no fim do ciclo de 120 dias, nota-se que no início do ciclo a variação relativa é alta, isto acontece devido aos absorvedores, depois de 30 a 90 dias a variação se estabiliza, com a formação do ^{239}Pu .

Tabela 5.13: Valores obtidos para a razão de conversão pelo SERPENT e pelo CINEW.

<i>tempo[dias]</i>	SERPENT	CINEW	Variação relativa%
1	$7,06803 \times 10^{-2}$	$7,03357 \times 10^{-2}$	$-3,44609 \times 10^{-4}$
2	$7,06803 \times 10^{-2}$	$7,03357 \times 10^{-2}$	$-3,44609 \times 10^{-4}$
5	$1,32549 \times 10^{-1}$	$1,31388 \times 10^{-1}$	$-1,16138 \times 10^{-3}$
10	$1,83932 \times 10^{-1}$	$1,81942 \times 10^{-1}$	$-1,99007 \times 10^{-3}$
20	$2,62612 \times 10^{-1}$	$2,59220 \times 10^{-1}$	$-3,39097 \times 10^{-3}$
30	$3,74199 \times 10^{-1}$	$3,68595 \times 10^{-1}$	$-5,60456 \times 10^{-3}$
40	$4,54439 \times 10^{-1}$	$4,46979 \times 10^{-1}$	$-7,45991 \times 10^{-3}$
50	$4,79729 \times 10^{-1}$	$4,71585 \times 10^{-1}$	$-8,14308 \times 10^{-3}$
60	$4,92349 \times 10^{-1}$	$4,83540 \times 10^{-1}$	$-8,80952 \times 10^{-3}$
90	$4,85236 \times 10^{-1}$	$4,75595 \times 10^{-1}$	$-9,64085 \times 10^{-3}$
120	$4,74654 \times 10^{-1}$	$4,63532 \times 10^{-1}$	$-1,11214 \times 10^{-2}$

Figura 5.35: Comparação da razão de conversão obtida pelo *SERPENT* e pelo *CINEW*.

É possível através do estudo dos coeficientes de sensibilidade analisar os erros associados aos dados as seções de choque contidos nas bibliotecas de dados nucleares propagando-os no cálculo, ou seja, obter o efeito dos possíveis erros oriundos da seções de choque em nossos cálculos, foi realizado um breve estudo desses erros, no caso do erro da seção de choque do ^{238}U , para uma reação x e um grupo g , na razão de conversão e fazendo uso da definição do coeficiente de sensibilidade, podemos definir

$$\frac{\delta CR}{CR} = S \times \frac{\delta \sigma_{xg}^{238\text{U}}}{\sigma_{xg}^{238\text{U}}}. \quad (5.2)$$

As Figuras 5.36 a 5.39 mostram os cálculos obtidos no erro associado a seção de choque do ^{238}U , onde notamos que no grupo 3, o erro é de 1,5% na seção de choque de captura e de 0,4% no grupo 4 e na Tabela 5.14 temos as incertezas colapsadas em 4 grupos de energia.

Tabela 5.14: Incertezas colapsadas em 4 grupos de energia.

grupo	$\frac{\Delta\sigma_{f1}^{238U}}{\sigma_{f1}^{238U}}$	$\frac{\Delta\sigma_{c1}^{238U}}{\sigma_{c1}^{238U}}$
1	1,4567	4,8298
2	$3,4502 \times 10^1$	2,5928
3	$1,8499 \times 10^1$	2,5966
4	8,0300	2,0599

Figura 5.36: Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 1.

Figura 5.37: Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 2.

Figura 5.38: Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 3.

Figura 5.39: Erro associado a seção de choque do ^{238}U no cálculo da razão conversão no grupo 4.

Capítulo 6

Conclusões

Os primeiros cálculos em análises de sensibilidade limitavam-se em cálculos utilizando perturbações de primeira ordem. Wigner [4] foi o primeiro a publicar um trabalho onde utilizava perturbações de primeira ordem no estudo com barras de diferentes materiais. A formulação utilizada por Wigner era baseada nos conceitos de mecânica quântica, que na época era uma ciência nova e pouco sabia-se sobre as interpretações e aplicações da mesma.

Após os trabalhos de Wigner as técnicas utilizadas nos cálculos que envolviam perturbações foram aprimorando-se e conseqüentemente, as aplicações em física de reatores, especialmente análise de queima, e evoluíram de problemas que envolviam cadeias simples para problemas sofisticados em cálculos que envolviam cadeias completas.

Muitos trabalhos contribuíram para tal desenvolvimento e o trabalho aqui apresentado também oferece uma contribuição particular para a teoria de análise de sensibilidade e apresenta um grande potencial para analisar sistemas que envolvam a dinâmica de queima de um do reator nuclear.

A equação para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade apresentada neste trabalho possui agilidade numérica, uma vez calculados os coeficientes de sensibilidade para análise de queima, é possível realizar e observar estimativas facilmente sem a necessidade de uma nova análise de sensibilidade ou nova

análise de queima.

No campo das análises de incertezas este trabalho possibilita as análises das incertezas provenientes de cálculos de transmutações e suas implicações na produção de diversos produtos de fissão. Além das análises de incertezas contidas nas bibliotecas de dados nucleares.

O estudo feito neste trabalho mostra que os coeficientes de sensibilidade das concentrações como parâmetro integral são importantes quando o objetivo é analisar a produção de um determinado nuclídeo, e o estudo da razão de conversão como parâmetro integral é importante quando a análise possui a necessidade de investigar qual tipo de seção de choque será importante na obtenção desta grandeza, fornecendo uma ferramenta para investigações de dados nucleares.

Futuramente este trabalho poderá ser também utilizado no estudo dos coeficientes de sensibilidade em análises de combustível reprocessado tipo MOX, onde é possível prever o comportamento da razão de conversão para um dado combustível.

Poderá ser implantado no CINEW novos dados nucleares como: constante de decaimento e "branching" das cadeias, para que possa ser possível prever a sensibilidade do provável caminho de uma determinada cadeia para a produção de um nuclídeo em partícula. Existe também possibilidade de propagar erros oriundos do método de Monte Carlo (Desvio Padrão) em problemas de depleção.

Este trabalho além de oferecer uma equação para determinar os coeficientes de sensibilidade, oferece um novo código que pode ser uma alternativa como ferramenta computacional em física de reatores, pois faz análise de sensibilidade e análise de queima simultaneamente.

Apêndice A

Notação matemática usada neste trabalho

A.1 Notação Vetorial

Neste trabalho os vetores são escritos como $\hat{N}$, as matrizes são descritas pela letra M e os vetores que descrevem pontos no espaço são escritos como $\hat{r} = (x, y, z)$.

A.2 Produtos internos de vetores e funções

As multiplicações vetoriais neste trabalho referem-se a seguinte operação,

$$\hat{A}.\hat{B} = A_1B_1 + A_2B_2 + \dots + A_nB_n. \quad (\text{A.1})$$

O produto interno de duas funções é definido como,

$$[g(x).f(x)]_x = \int g(x).f(x)dx. \quad (\text{A.2})$$

A.3 Derivada de vetores

A derivativa de uma função escalar em relação a um vetor é definida por,

$$\frac{\partial f}{\partial \hat{A}}(\hat{A}) = \left(\frac{\partial f}{\partial A_1}, \frac{\partial f}{\partial A_2}, \dots, \frac{\partial f}{\partial A_n} \right). \quad (\text{A.3})$$

A.4 Derivada de um funcional

Esta é uma generalização do conceito da derivada de um vetor, esta operação transforma um escalar em um vetor. Se $K[f(x)]$ é um funcional definido por $K = [F[f(x)]]_x$, onde F é uma densidade de quantidade composta por uma função $f(x)$, então temos para a derivada funcional por unidade de x ,

$$\frac{\partial K}{\partial f(x)} = \frac{\partial F}{\partial f(x)}. \quad (\text{A.4})$$

A.5 Variação funcional

A variação funcional é uma generalização do conceito de diferencial e é definida como,

$$\delta K[f(x)] = \left[\frac{\partial K}{\partial f} \cdot \Delta f \right]_x = \left[\frac{\partial F}{\partial f} \cdot \Delta f \right]_x. \quad (\text{A.5})$$

Nesta expressão é assumido que Δf é pequena e os termos de segunda ordem são ignorados. Um funcional é estacionário em uma mesma função $f_0(x)$ se o gradiente do funcional valem. Dado um ponto, K terá um ponto de extremo ou um ponto de inflecção.

A.6 Funcional da série de Taylor

Usando as definições de A.4 e A.5 a expansão em Taylor de um funcional é definida como na expansão em série de uma função,

$$K[f + \Delta f] = K[f] + \left[\frac{\partial K}{\partial f} \cdot \Delta f \right]_x + \frac{1}{2} \left[\frac{\partial^2 K}{\partial f^2} \cdot \Delta f^2 \right]_{x,x'} + \dots \quad (\text{A.6})$$

Apêndice B

Métodos de Resolução da Equação de Decaimento

B.1 Transformada de Laplace

A resolução de equações diferenciais por intermédio das chamadas transformadas integrais consiste em transformar uma dada equação diferencial em uma outra equação, a princípio, que possua uma resolução que envolva um menor grau de dificuldade. Após resolvida a nova equação, aplica-se a transformada inversa na solução obtida, obtendo assim a solução da equação original.

A transformada de Laplace é muito efetiva em problemas que envolvam dependência temporal, sendo a transformada integral mais antiga de todas, remonta do trabalho de Laplace sobre a teoria da probabilidade, trabalho apresentado sob o título “La Théorie Analytique des Probabilités” e data de 1780.

Sendo assim a transformada de Laplace de uma função $f(t)$, que pode ser denotada por $F(s)$ ou $\mathcal{L}[f(t)]$, é por definição dada pela integral

$$F(s) \equiv \mathcal{L}[f(t)] = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt, \quad (\text{B.1})$$

sendo s , a variável transformada, positiva¹, a fim de que esta integral imprópria

¹A variável transformada s deve ser tal que $\text{Re}(s) > 0$.

converja.

É válido apresentarmos algumas das propriedades da transformada de Laplace, sendo estas, dadas como teoremas.

Teorema 1 (Linearidade)

Se $\mathcal{L}[f(t)]$ e $\mathcal{L}[g(t)]$ são as transformadas de Laplace das funções $f(t)$ e $g(t)$, então

$$\mathcal{L}[a_1 f(t) + a_2 g(t)] = a_1 \mathcal{L}[f(t)] + a_2 \mathcal{L}[g(t)], \quad (\text{B.2})$$

para quaisquer constantes a_1 e a_2 .

Teorema 2 (Deslocamento)

Se a transformada de Laplace da função $f(t)$ é $F(s)$, então

$$\mathcal{L}[e^{at} f(t)] = F(s - a), \quad (\text{B.3})$$

com $s > a$.

Teorema 3 (Escala)

Se a transformada de Laplace da função $f(t)$ é $F(s)$, então

$$\mathcal{L}[f(at)] = \frac{1}{a} F\left(\frac{s}{a}\right), \quad (\text{B.4})$$

para $a > 0$.

Teorema 4 (Diferenciação)

Seja $f(t)$ uma função contínua e sua derivada $f'(t)$ contínua por pedaços no intervalo $0 \leq t \leq T$ para $T > 0$. Considere uma função $f(t)$ de ordem exponencial quando $t \rightarrow \infty$, então a transformada de Laplace da derivada $f'(t)$

existe e é dada por

$$\mathcal{L} [f'(t)] = s\mathcal{L} [f(t)] - f(0). \quad (\text{B.5})$$

O procedimento para a segunda derivada é semelhante

$$\mathcal{L} [f''(t)] = s^2\mathcal{L} [f(t)] - s\mathcal{L} [f(t)] - \mathcal{L} [f'(t)]. \quad (\text{B.6})$$

Teorema 5 (Integração)

Se $F(s)$ é a transformada de Laplace de $f(t)$, então

$$\mathcal{L} \left[\int_0^t f(\vartheta) d\vartheta \right] = \frac{1}{s} F(s), \quad (\text{B.7})$$

desde que $\int_0^t f(\vartheta) d\vartheta$ seja de ordem exponencial².

Teorema 6 (Convolução)

Sejam $F(s)$ e $G(s)$ as transformadas de Laplace das funções $f(t)$ e $g(t)$, respectivamente,

$$\mathcal{L} [f(t) * g(t)] = F(s)G(s), \quad (\text{B.8})$$

ou seja, a transformada de Laplace do produto de convolução $f(t) * g(t)$,³ é o produto das transformadas, $F(s)G(s)$.

²Dizemos que uma função $f(t)$ é de ordem exponencial κ quando $t \rightarrow \infty$, ou simplesmente que $f(t)$ é de ordem exponencial, se existirem constantes reais $M > 0$ e $\kappa\gamma$ tais que $|f(t)| < M \exp(\gamma t)$ quando $t \rightarrow \infty$, esta propriedade é escrita matematicamente como

$$f(t) = \mathcal{O}(e^{\gamma t}).$$

³A função $f(t) * g(t)$ é definida como

$$f(t) * g(t) = \int_0^t f(t - \vartheta)g(\vartheta) d\vartheta$$

e é chamada de convolução das funções $f(t)$ e $g(t)$.

B.2 Transformada Inversa de Laplace

A transformada inversa de Laplace é dada pela integral

$$\mathcal{L}^{-1}[F(s)] \equiv f(t) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} F(s) ds & \text{se } t > 0, \\ 0 & \text{se } t < 0, \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

a integração é realizada ao longo de uma reta $s = \gamma$ no plano convexo, com $s = x + iy$. O número complexo γ deve ser escolhido de modo que a reta $\text{Re}(s) = \gamma$ esteja á direita de todas as singularidades⁴. Então supondo que todas as singularidades de $F(s)$ são pólos e se encontram à esquerda da reta $\text{Re}(s) = \gamma$, onde γ é uma constante, obviamente para o cálculo da transformada inversa usaremos teorema dos resíduos,

$$f(t) = \sum \text{Resíduos de } e^{st} F(s) \text{ nos pólos de } F(s). \quad (\text{B.10})$$

Figura B.1: Contorno dos pólos da equação.

⁴pólos, pontos de ramificação ou singularidades essenciais, do integrando, a fim de assegurar que o seguinte contorno $\int_0^\infty e^{-\gamma x} |f(x)| dx < \infty$, conhecido como *contorno de Bromwich*

B.3 Resolução da Equação de Decaimento através da Transformada de Laplace

A mudança de variável de um tempo t para um parâmetro s , é obtida através da transformada de Laplace e posteriormente a sua inversa para voltarmos ao tempo t . Logo aplicando a transformada de Laplace

$$\mathcal{L}[f(t)] = \int_0^\infty e^{-st} f(t) dt, \quad (\text{B.11})$$

no seguinte decaimento

$$N_i^* \rightarrow N_3^* \rightarrow N_2^* \rightarrow N_1^* \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{dN_i^*}{dt} = -\eta_i N_i^*, \quad (\text{B.13})$$

para o i^{th} nuclídeo a equação geral

$$s\tilde{N}_i^* - \tilde{N}_{i0}^* = -\eta_i \tilde{N}_i^*, \quad (\text{B.14})$$

$$\tilde{N}_i^* = \frac{\tilde{N}_{i0}^*}{(s + \eta_i)}, \quad (\text{B.15})$$

$$s\tilde{N}_{i-1}^* - \tilde{N}_{i-10}^* = \omega_{i-1} \tilde{N}_i^* - \eta_{i-1} \tilde{N}_{i-1}^*, \quad (\text{B.16})$$

$$\tilde{N}_{i-1}^* = \omega_{i-1} \frac{\tilde{N}_{i0}^*}{(s + \eta_i)(s + \eta_{i-1})} + \frac{\tilde{N}_{i-10}^*}{(s + \eta_{i-1})}, \quad (\text{B.17})$$

$$s\tilde{N}_{i-2}^* - \tilde{N}_{i-20}^* = \omega_{i-2} \tilde{N}_{i-1}^* - \eta_{i-2} \tilde{N}_{i-2}^*, \quad (\text{B.18})$$

$$\tilde{N}_{i-2}^* = \omega_{i-2} \omega_{i-1} \frac{\tilde{N}_{i0}^*}{(s + \eta_i)(s + \eta_{i-1})(s + \eta_{i-2})} + \omega_{i-2} \frac{\tilde{N}_{i-10}^*}{(s + \eta_{i-1})(s + \eta_{i-2})} + \frac{\tilde{N}_{i-20}^*}{(s + \eta_{i-2})}, \quad (\text{B.19})$$

$$s\tilde{N}_1^* + \eta_1 \tilde{N}_i^* = \omega_1 \tilde{N}_2^* + \tilde{N}_{10}^*. \quad (\text{B.20})$$

Por indução podemos escrever de uma maneira geral

$$\tilde{N}_{i-n}^* = \sum_{k=i}^{i-n} \frac{1}{\omega_k} \prod_{m=k}^{i-n} \omega_m \frac{\tilde{N}_{k0}^*}{\prod_{j=k}^{i-n} (s + \eta_j)} \quad (\text{B.21})$$

definindo os índices

$$i - n = l \quad (\text{B.22})$$

$$i = l + n \quad (\text{B.23})$$

$$\tilde{N}_l^* = \sum_{k=l+n}^l \frac{1}{\omega_k} \prod_{m=k}^l \omega_m \frac{\tilde{N}_{k0}^*}{\prod_{j=k}^l (s + \eta_j)}. \quad (\text{B.24})$$

Para voltarmos a equação inicial aplicamos a transformada inversa de Laplace

$$\mathcal{L}^{-1}\{\diamond\} = \frac{1}{2\pi i} \lim_{z \rightarrow \infty} \int_{\gamma-iz}^{\gamma+iz} \diamond e^{st} ds, \quad (\text{B.25})$$

na eq.(B.24)

$$\tilde{N}_{i-n}^* = \sum_{k=i}^{i-n} \frac{1}{\omega_k} \prod_{m=k}^{i-n} \omega_m N_{k0}^* \frac{1}{2\pi i} \lim_{z \rightarrow \infty} \int_{\gamma-iz}^{\gamma+iz} \frac{e^{st}}{\prod_{j=k}^{i-n} (s + \eta_j)} ds, \quad (\text{B.26})$$

onde a integral da equação acima é dada pela teoria de resíduos

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \int_{\gamma-iz}^{\gamma+iz} \frac{e^{st}}{\prod_{j=k}^{i-n} (s + \eta_j)} ds = \sum_l \text{res} \left(\frac{e^{st}}{\prod_{j=k}^{i-n} (s + \eta_j)}, s_l \right), \quad (\text{B.27})$$

$$\text{res} \left(\frac{e^{st}}{\prod_{j=k}^{i-n} (s + \eta_j)}, \eta_l \right) = \lim_{s \rightarrow -\eta_l} (s + \eta_l) \frac{e^{st}}{\prod_{j=k}^{i-n} (s + \eta_j)} = \frac{e^{-\eta_l t}}{\prod_{j=k \neq l}^{i-n} (\eta_j - \eta_l)},$$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \int_{\gamma-iz}^{\gamma+iz} \frac{e^{st}}{\prod_{j=k}^{i-n} (s + \eta_j)} ds = 2\pi i \sum_{l=k}^{i-n} \frac{e^{-\eta_l t}}{\prod_{j=k \neq l}^{i-n} (\eta_j - \eta_l)} \quad (\text{B.28})$$

Substituindo então o resultado acima em eq.(B.25), obtemos

$$\tilde{N}_{i-n}^* = \sum_{k=i}^{i-n} N_{k0}^* \left(\prod_{m=k}^{i-n} \omega_m \right) \sum_{l=k}^{i-n} \frac{e^{-\eta_l t}}{\prod_{j=k \neq l}^{i-n} (\eta_j - \eta_l)} \quad (\text{B.29})$$

B.3.1 Matriz Exponencial

As mudanças que ocorrem no combustível de um reator nuclear, exposto há um fluxo de nêutrons são descritas pelas equações de transmutação de núclídeos que pode ser escrita da seguinte maneira

$$\frac{dN}{dt} = AN, \quad N(0) = N_0, \quad (\text{B.30})$$

onde A é a matriz de queima e N é a concentração de núclídeos. Uma vez escrita em sua forma matricial a equação de transmutação pode ser resolvida através do método de exponencial de matrizes através de

$$N(t) = e^{At} N_0, \quad (\text{B.31})$$

onde a exponencial At pode ser definida por uma série de potências, escrita de uma maneira geral como,

$$e^{At} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (At)^k, \quad (\text{B.32})$$

onde $A^0 = I$. Existem várias maneiras de se calcular a exponencial de uma matriz ⁵, a escolha do método irá depender do tipo de equação a ser resolvida combinada ao método computacional que melhor resolva o problema que almeja ser observado.

⁵M. Pusa, Numerical methods for numerical nuclear fuel burnup calculation, Ph. D. Thesis, VTT Technical Research Center of Finland, 2013.

Apêndice C

Propriedades da Teoria Adjunta

O campo de concentrações em um reator é expresso por intermédio do vetor densidades, que pode ser escrito como:

$$\hat{N}(\hat{r}, t) = \begin{bmatrix} N_1(\hat{r}, t) \\ N_2(\hat{r}, t) \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ N_i(\hat{r}, t) \end{bmatrix} \quad (\text{C.1})$$

onde $N_i(\hat{r}, t)$ é a densidade atômica do i -ésimo nuclídeo em uma dada posição $\hat{r}$ e instante t .

A sensibilidade de uma determinada resposta em relação a um parâmetro estudado é definida como a razão a variação percentual desta resposta em relação ao parâmetro estudado.

Como exemplo assuma que a resposta é a concentração do i -ésimo nuclídeo N_i e o parâmetro é a secção de choque σ , desta forma é possível escrever, em primeira aproximação, o coeficiente de sensibilidade como:

$$S_i(\hat{r}) = \frac{\frac{dN_i(\hat{r}, t)}{N_i(\hat{r}, t)}}{\frac{d\sigma}{\sigma}} = \frac{\sigma}{N_i(\hat{r}, t)} \frac{dN_i(\hat{r}, t)}{d\sigma}. \quad (\text{C.2})$$

Vamos considerar o reator como pontual, de forma que a dependência explícita da posição pode ser desconsiderada, tal suposição é bastante comum pois geralmente cada região de queima é tratada independentemente no estudo de um reator.

As equações de queima que governam a variação das densidades atômicas de um reator podem ser expressas em sua forma matricial como

$$\frac{d}{dt}\hat{N}(t) = \hat{M}\hat{N}(t), \quad (\text{C.3})$$

onde $\hat{M}$ é chamada de matriz queima.

Vamos considerar também a matriz adjunta da matriz queima que pode ser escrita de maneira geral como

$$-\frac{d}{dt}\hat{N}^*(t) = \hat{M}^*\hat{N}^*(t) + F^*(t), \quad (\text{C.4})$$

onde $\hat{N}^*$ é o campo adjunto associado ao campo $\hat{N}$ e $\hat{M}^*$ a matriz transposta de $\hat{M}$ e F^* é a fonte adjunta que a princípio é arbitrária.

Derivando C.3 em relação ao parâmetro σ ,

$$\frac{d}{dt}\hat{N}(t) = \hat{M}\hat{N}(t), \quad (\text{C.5})$$

$$\frac{d}{d\sigma}\frac{d}{dt}\hat{N}(t) = \frac{d}{d\sigma}\hat{M}\hat{N}(t) \quad (\text{C.6})$$

ou

$$\frac{d}{dt}\frac{d}{d\sigma}\hat{N}(t) = \frac{d\hat{M}}{d\sigma}\hat{N}(t) + \hat{M}\frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma}, \quad (\text{C.7})$$

aplicando a função adjunta na equação anterior e integrando de um tempo 0 a

t_f ou ¹

$$\hat{N}^* \left[\frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma} \right]_0^{t_f} - \int_0^{t_f} dt \frac{d\hat{N}^*(t)}{dt} \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma} = \int_0^{t_f} dt \hat{N}^*(t) \frac{d\hat{M}}{d\sigma} \hat{N}(t) + \int_0^{t_f} dt \hat{M}^* \hat{N}^*(t) \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma}, \quad (\text{C.8})$$

Podemos reescrever a equação acima como,

$$\hat{N}^* \left[\frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma} \right]_0^{t_f} = \int_0^{t_f} dt \hat{N}(t) \frac{d\hat{M}}{d\sigma} \hat{N}(t) + \int_0^{t_f} dt F^*(t) \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma} \quad (\text{C.9})$$

e finalmente,

$$\hat{N}^*(t_f) \frac{d\hat{N}(t_f)}{d\sigma} - \hat{N}^*(0) \frac{d\hat{N}(0)}{d\sigma} = \int_0^{t_f} dt \hat{N}^*(t) \frac{d\hat{M}}{d\sigma} \hat{N}(t) + \int_0^{t_f} dt F^*(t) \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma}. \quad (\text{C.10})$$

A condição inicial $\frac{d\hat{N}(0)}{d\sigma} = 0$ é fisicamente verdadeira ou seja

$$\frac{d\hat{N}(t_f)}{d\sigma} = \frac{\int_0^{t_f} dt \hat{N}^*(t) \frac{d\hat{M}}{d\sigma} \hat{N}(t) + \int_0^{t_f} dt F^*(t) \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma}}{\hat{N}^*(t_f)}. \quad (\text{C.11})$$

Assegurando assim, a condição final para $N^*(t_f) = \hat{h}_i$, sendo $\hat{h}_i$ o vetor realização e possui valor 1 para o i -ésimo elemento e 0 para os demais.

Para a obtenção da fonte adjunta considere a função resposta escrita sobre a forma funcional definida no domínio,

$$R[\hat{N}, \sigma] = \int_{t_1}^{t_2} H[\hat{N}, \sigma] dt, \quad (\text{C.12})$$

devemos notar que a variação (perturbação) de R é sujeita a lei (ou vínculo);

$$\frac{d}{dt} \hat{N}(t) = \hat{M} \hat{N}(t). \quad (\text{C.13})$$

¹ Utilizando $\int_0^{t_f} dt \hat{N}^* \frac{d}{dt} \left(\frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma} \right) = \hat{N}^* \left[\frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma} \right] - \int_0^{t_f} dt \frac{d\hat{N}^*(t)}{dt} \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma}$ e a definição de adjunta: $\int_0^{t_f} dt \hat{N}^*(t) \hat{M} \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma} = \int_0^{t_f} dt \hat{M} \hat{N}(t) \frac{d\hat{N}(t)}{d\sigma}$.

Na notação funcional podemos escrever o funcional auxiliar de Lagrange como

$$L \left[\hat{N}, \sigma, \Gamma \right] = \int_{t_1}^{t_2} H \left[\hat{N}, \sigma \right] dt + \int_{t_1}^{t_2} \Gamma(t) \left(-\frac{d}{dt} \hat{N}(t) + \hat{M} \hat{N}(t) \right) dt, \quad (\text{C.14})$$

onde Γ é o chamado multiplicador de Lagrange.

Considere a derivada de C.14 em relação $\hat{N}$

$$\frac{\partial L}{\partial \hat{N}} = \frac{\partial}{\partial \hat{N}} \left[\int_{t_1}^{t_2} H \left[\hat{N}, \sigma \right] dt + \int_{t_1}^{t_2} \Gamma(t) \left(-\frac{d}{dt} \hat{N}(t) + \hat{M} \hat{N}(t) \right) dt \right], \quad (\text{C.15})$$

para que a expressão acima seja verdadeira $\frac{\partial L}{\partial \hat{N}} = 0$,

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial H}{\partial \hat{N}} + \left(\frac{d}{dt} + \hat{M}^* \right) \Gamma(t) \right] dt = 0, \quad (\text{C.16})$$

logo

$$-\frac{d\Gamma(t)}{dt} = \hat{M}^* \Gamma(t) + \frac{\partial H}{\partial \hat{N}}, \quad (\text{C.17})$$

$$\Gamma(t) = \hat{N}^*(t), \quad (\text{C.18})$$

$$S^*(t) = \frac{\partial H}{\partial \hat{N}}, \quad (\text{C.19})$$

$$R \left[\hat{N}, \sigma \right] = \int_{t_1}^{t_2} H \left[\hat{N}, \sigma \right] \delta(t_f - t) dt = H \left[\hat{N}, \sigma \right]_{t=t_f}, \quad (\text{C.20})$$

$$-\int_{t_f-\delta}^{t_F} dt \frac{d}{dt} \hat{N}^*(t) = \int_{t_f-\delta}^{t_F} dt \hat{M}^* \hat{N}^*(t) + \int_{t_f-\delta}^{t_F} dt \frac{\partial H}{\partial \hat{N}} \quad (\text{C.21})$$

$$-\int_{t_f-\delta}^{t_F} dt \frac{d}{dt} \hat{N}^*(t) = \int_{t_f-\delta}^{t_F} dt \hat{M}^* \hat{N}^*(t) + \int_{t_f-\delta}^{t_F} dt \frac{\partial H}{\partial \hat{N}} \delta(t_f - t) \quad (\text{C.22})$$

$$\hat{N}^*(t_f) - \hat{N}^*(t_f - \delta) = \frac{\partial H}{\partial \hat{N}} \Big|_{t=t_f} \quad (\text{C.23})$$

$$-\frac{d\hat{N}^*(t)}{dt} = \hat{M}^* \hat{N}^*(t) \quad (\text{C.24})$$

$$\hat{N}^*(t_f) = \frac{\partial H}{\partial \hat{N}} \Big|_{t=t_f} \quad (\text{C.25})$$

Apêndice D

Equações Adjuntas de Queima

Vejamos agora uma aproximação para as equações adjuntas, nesta derivação foi utilizada a técnica de teoria variacional descrita por Pomraning ¹.

Na formulação quase-estática a resposta é escrita como,

$$R_{QE} = R(\Phi_i, \psi_i, \hat{N}, \hat{h}). \quad (D.1)$$

Sendo assim, consideremos o seguinte funcional

$$\begin{aligned} K[\hat{N}, \psi_i, \Phi_i, \alpha, \lambda, h] &= R[\hat{N}, \psi_i, \Phi_i, \alpha, \lambda, h] + \\ &\sum_{i=1}^T \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} \left[dt \hat{N}^*(\hat{r}, t) \times \left([\psi_i \hat{R}]_{E,\Omega} + \hat{D} - \frac{\partial}{\partial t} \right) \hat{N}(\hat{r}, t) + \hat{C} \right]_V dt + \\ &- \sum_{i=1}^T \left[\Gamma_i^*(\hat{\rho}) L(\hat{N}_i) - \lambda_i F(\hat{N}_i) \psi_i(\hat{\rho}) \right]_{\Omega, E, V} + \\ &- \sum_{i=1}^T P_i^* \left([\psi_i \hat{\sigma}_f \hat{N}_i]_{\Omega, E, V} \Phi_i - P_i \right), \end{aligned} \quad (D.2)$$

onde T é o intervalo de tempo para o caso estático e $N_i = N(\hat{r}, t)$ e $N^*(\hat{r}, t)$, $\Gamma_i^*(\rho)$, P_i^* são multiplicadores de Lagrange. Se P_i^* e Γ_i^* são definidos como zero e se a dependência espacial é ignorada, então o funcional acima se reduz ao funcional ,

¹G. pomraning, Variational Principle for Eigenvalue Equations, Journal of Mathematical Physics, 8, 149-160, 1967.

R usado no caso desacoplado para o caso de depleção pontual.

Se $\hat{N}$, ψ_i e Φ_i são soluções exatas para as equações de queima para o caso quasi-estático, então

$$K = R. \quad (\text{D.3})$$

Uma pequena variação no parâmetro α irá resultar em

$$K \rightarrow K'(\hat{N}', \psi_i, \Phi_i, \alpha', \lambda', h'), \quad (\text{D.4})$$

onde $\hat{N}'$, ψ_i , Φ_i , α' , λ' , h' , são os valores dessas variáveis no estado perturbado, se $\hat{N}'$, ψ_i , Φ_i são soluções exatas para as equações do caso quase-estático perturbado, então

$$K' = R'. \quad (\text{D.5})$$

Expandindo K' a partir do estado perturbado e desprezando os termos de segunda ordem temos

$$K' = K \left[\frac{\partial K}{\partial \alpha} \delta \alpha + \frac{\partial K}{\partial \hat{N}} \delta \hat{N} + \frac{\partial K}{\partial h} \delta h + \sum_i \left(\frac{\partial K}{\partial \psi_i} \delta \psi_i + \frac{\partial K}{\partial \Phi_i} \delta \Phi_i + \frac{\partial K}{\partial \lambda_i} \delta \lambda_i \right) \right]_{\rho}, \quad (\text{D.6})$$

Sendo $\frac{\partial K}{\partial N} = \frac{\partial K}{\partial \psi_i} = \frac{\partial K}{\partial \Phi_i} = 0$

$$\delta R = \left[\frac{\partial K}{\partial \alpha} \delta \alpha + \frac{\partial K}{\partial h} \delta h \right]_{\rho}, \quad (\text{D.7})$$

$$\frac{\delta R}{R} = \left[\frac{\alpha}{R} \left(\frac{\partial K}{\partial \alpha} + \frac{\partial R}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial \alpha} \right) \frac{\delta \alpha}{\alpha} \right]_{\rho}, \quad (\text{D.8})$$

$$\frac{\frac{\delta R}{R}}{\frac{\delta \alpha}{\alpha}} = \left[\frac{\alpha}{R} \left(\frac{\partial K}{\partial \alpha} + \frac{\partial R}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial \alpha} \right) \right]_{\rho}, \quad (\text{D.9})$$

logo o coeficiente de sensibilidade é

$$S(\hat{\rho}) = \frac{\alpha}{R} \left(\frac{\partial K}{\partial \alpha} + \frac{\partial R}{\partial h} \frac{\partial h}{\partial \alpha} \right). \quad (\text{D.10})$$

As derivadas parciais da equação acima são triviais, então, o problema de análise de sensibilidade para as equações de queima para o caso quase-estático se reduz em encontrar as condições estacionárias apropriadas sobre o funcional K . Para definirmos as próximas equações devemos usar as equações de Euler, que correspondem as equações adjuntas.

Examinemos as derivadas do funcional K em relação a $\hat{N}$, ψ_i , Φ_i , e sendo verdade que $\frac{\partial K}{\partial N} = \frac{\partial K}{\partial \psi_i} = \frac{\partial K}{\partial \Phi_i} = 0$, consideremos primeiramente a derivativa do funcional K em relação a Φ_i , no apêndice A é feita uma breve demonstração de derivada funcional,

$$\frac{\partial K}{\partial \Phi_i} = \frac{\partial R}{\partial \Phi_i} + \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} \left[N^* [\psi_i R]_{E,\Omega} N \right]_V dt - P_i^* [\psi_i \sigma_f N_i]_{E,\Omega,V}. \quad (D.11)$$

Da equação acima temos a potência adjunta

$$P_i^* = \frac{\int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} \left[N^* [\psi_i R]_{E,\Omega} N \right]_V dt}{[\psi_i \sigma_f N_i]_{E,\Omega,V}} + \frac{\partial R}{\partial \Phi_i}, \quad (D.12)$$

Para calcularmos $\frac{\partial K}{\partial \psi}$, emprega-se a propriedade comutativa dos operadores adjuntos,

$$\frac{\partial K}{\partial \psi_i} = \left\{ \frac{\partial R}{\partial \psi_i} - \left[L^*(N_i) - \lambda_i F^*(N_i) \Gamma_i^* - P_i^* \Phi_i \sigma_f N_i + \Phi_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} N^* R N dt - a \right] \right\}, \quad (D.13)$$

onde L^* , $F^* \equiv 0$ são operadores adjuntos de L e F , respectivamente. A validade destes termos implica que

$$[L^*(N_i) - \lambda_i F^*(N_i)] \Gamma_i^*(\hat{\rho}) = Q_i^*, \quad (D.14)$$

onde

$$Q_i^*(\hat{\rho}) = \frac{\partial R}{\partial \psi_i} + \Phi_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} N^*(\hat{r}, t) R(\sigma) N(\hat{r}, t) dt - \Phi_i P_i^* \sigma_f N_i - ai. \quad (D.15)$$

A forma do fluxo é obtida para cada intervalo de tempo a partir da equação de autovalores de Boltzmann calculada a partir de um estado inicial t_i

$$\{L(N_i) - \lambda F(N_i)\} \psi_i(\hat{r}, E, \hat{\Omega}) = 0, \quad (\text{D.16})$$

as eqs.(D.14) e (D.16), impoem a ortogonalidade da fonte adjunta,

$$[\psi_i Q_i^*]_{E,\Omega,V} = 0, \quad \text{para todo } t_i, \quad (\text{D.17})$$

Das eqs.(D.12) e (D.15) temos

$$\left[\psi_i \frac{\partial R}{\partial \psi_i} \right]_{E,\Omega,V} - \Phi \left[\frac{\partial R}{\partial \Phi_i} \right]_{E,\Omega,V} = a_i. \quad (\text{D.18})$$

Onde a_i assume um valor fixo, para muitos casos este valor é zero, por exemplo se R for bilinear em ψ_i e Φ_i ou a média destes forem bilinear, então a é zero.

O termo $\frac{\partial K}{\partial \lambda_i}$ é

$$\frac{\partial K}{\partial \lambda_i} = [\Gamma_i^*(\hat{\rho}) F(N_i) \psi_i]_{E,\Omega,V} = 0, \quad (\text{D.19})$$

o que força $\Gamma_i^*(\hat{\rho})$ ser ortogonal a fonte de fissão em $t = t_i$, esta condição requer que Γ_i^* não contenha modo fundamental a partir da solução homogênea, ou seja, se Γ_p^* é solução de eq.(D.14) e é ortogonal a Φ_H^* , onde Φ_H^* é a solução fundamental para a equação homogênea, então $\Gamma_p^* + b\Phi_H^*$ é solução para todo b .

Contudo, a eq.(D.19) fixa o valor de b igual a zero, então $\Gamma_i^* = \Gamma_p^*$, mas isto só é verdade para casos onde não se reinicia o k , isto é, λ é mantido perturbações dos dados. Raramente λ varia, mas para o caso onde λ é invariante é feito um ajuste da variável de controle N_c , então a partir de eq.(D.19) é possível mostrar a seguinte condição de ortogonalidade

$$\left[\Gamma_i^*(\hat{\rho}), \frac{\partial}{\partial N_c} [L(N_i) - \lambda_i F(N_i)] \psi_i \right]_{\Omega,E,V} = \frac{\partial K}{\partial N_c} = 0. \quad (\text{D.20})$$

Agora o valor de b não é zero mas é dado por

$$\frac{\left[\Gamma_p^* \frac{\partial}{\partial N_c} (L - \lambda P) \psi \right]_{\Omega, E, V}}{\left[\Phi^* \frac{\partial}{\partial N_c} (L - \lambda P) \psi \right]_{\Omega, E, V}}. \quad (\text{D.21})$$

A condição de Euler correspondente a variação de $N(\hat{r}, t)$ é um pouco mais complexa para outras variáveis, em vez de resolver a derivativa funcional, é mais simples considerar a variação de K em relação a $\delta \hat{N}$,

$$\begin{aligned} \delta K [\delta \hat{N}] &= \left[\frac{\partial K}{\partial \hat{N}}, \delta \hat{N} \right]_{\rho} + \sum_{i=1}^T \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} \left[\delta \hat{N}(\hat{r}, t) \times \left([\psi_i \hat{R}^*]_{\Omega, E} \Phi_i + \hat{D}^* + \frac{\partial}{\partial t} \right) \hat{N}^* \right]_V dt + \\ &- \sum_{i=1}^T \left[\left(\hat{N}_{i+1}^{*-} \delta \hat{N}_{i+1}^- - \hat{N}_i^{*+} \delta \hat{N}_i^+ \right) \right]_V - \sum_{i=1}^T \left[\delta \hat{N}_i \left[\Gamma_i^* \frac{\partial}{\partial \hat{N}_i} \left[L(\hat{N}_i) - \lambda_i F(\hat{N}_i) \right] \psi_i \right]_{\Omega, E} \right]_V + \\ &- \sum_{i=1}^T P_i^* \Phi_i \left[\delta \hat{N}_i [\psi_i \hat{\sigma}_f]_{\Omega, E} \right]_V, \end{aligned} \quad (\text{D.22})$$

onde $N_{i+1}^{*-} = N^*(\hat{r}, t_{i+1}^-)$ e assim por diante, $\hat{R}^*$ e $\hat{D}^*$ são as matrizes transpostas de $\hat{R}$ e $\hat{D}$

As primeiras duas expressões do lado direito da eq.(D.22) são válidas se

$$\Phi_i [\psi_i R^*]_{E, \Omega} N^* + D^* N^* = -\frac{\partial}{\partial t} N^* - \left[\frac{\partial R}{\partial N} \right]_{\Omega, E} \quad t_i^+ < t < t_{i+1}^-, \quad (\text{D.23})$$

a equação acima pode ser escrita

$$M^* N^* + C^* = -\frac{\partial}{\partial t} N^*, \quad (\text{D.24})$$

onde

$$C^* = \left[\frac{\partial R}{\partial N} \right]_{\Omega, E}. \quad (\text{D.25})$$

A equação acima é válida para o intervalo aberto (t_i, t_{i+1}) , mas a questão do comportamento de $N^*(\hat{r}, t)$ nos contornos de t_i . Os termos restantes da

eq.(D.22) forneceram as condições de contorno necessárias para cada intervalo de tempo, estes termos podem ser escritos como

$$\sum_{i=1}^T \left[\delta N_i \left\{ N_{i+}^* - \left[\Gamma_i^* \frac{\partial}{\partial N_i} [L(N_i) - \lambda_i F(N_i)] \psi_i \right]_{\Omega, E} - \Phi_i P_i^* [\psi_i \sigma_f]_{\Omega, E} \right\} - \delta N_{1+1} N_{i+1}^{*-} \right]_V, \quad (\text{D.26})$$

onde a condição de continuidade do nuclídeo é imposta

$$N_i = N_{i-} = N_{i+}, \quad (\text{D.27})$$

expandindo a soma dada pela eq.(D.26) obtemos

$$\begin{aligned} & \left[\delta N_0 \left\{ N_0^* - \left[\Gamma_0^* \frac{\partial}{\partial \hat{N}_0} (L - \lambda F) \psi_0 + P_0^* \Phi_0 \psi_0 \hat{\sigma}_f \right]_{\Omega, E} \right\} + \right. \\ & \left. + \delta \hat{N}_1 \left\{ \left(\hat{N}_{1+}^* - \hat{N}_{1-}^* \right) - \left[\Gamma_1^* \frac{\partial}{\partial \hat{N}_1} (L - \lambda F) \psi_1 + \hat{P}_1^* \Phi_1 \psi_1 \hat{\sigma}_f \right]_{\Omega, E} \right\} \dots - \delta \hat{N}_f \hat{N}_f^* \right]_V. \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

Impondo a descontinuidade do nuclídeo adjunto, os termos que contêm δN_i valem, exceto em $t = 0$ e em $t = t_f$, então reescrevemos $\hat{N}^*(\hat{r}, t)$,

$$\hat{N}^*(\hat{r}, t_i^-) = \hat{N}^*(\hat{r}, t_i^+) - \left[\Gamma_i^* \frac{\partial}{\partial \hat{N}_i} (L - \lambda F) \psi_i + \Phi_i P_i^* \hat{\sigma}_f \psi_i \right]_{\Omega, E} \quad (\text{D.29})$$

$$= \hat{N}^*(\hat{r}, t_i^+) - [\Gamma_i^* \beta + P_i^* \Pi_i]_{\Omega, E}, \quad (\text{D.30})$$

onde

$$\beta_i = \frac{\partial}{\partial N_i} [L(\hat{N}_i) - \lambda_i F(\hat{N}_i)] \psi_i, \quad (\text{D.31})$$

$$\Pi_i = \Phi_i \hat{\sigma}_f \psi_i. \quad (\text{D.32})$$

O segundo termo do lado direito da eq.(D.23) representa a condição de "jump condition" sobre $\hat{N}^*$ em $t = t_i$, este valor depende da magnitude de outras variáveis adjuntas como Γ_i^* e P_i^* .

O termo contendo $\delta\hat{N}_f$ na eq.(D.28) vale se a condição final de $\hat{N}^*$ é

$$\hat{N}^*(\hat{r}, t_f) = 0. \quad (\text{D.33})$$

Com todas as restrições anteriormente mostradas a eq.(D.28) se reduz a

$$\left[\delta\hat{N}_0 \left\{ \hat{N}_0^* - [\Gamma_0^* \beta_0 + P_0^* \Pi_0]_{\Omega, E} \right\} \right]_V. \quad (\text{D.34})$$

Podemos então definir o coeficiente de sensibilidade para a condição inicial de um nuclídeo m

$$S_0^m = N_0^m \left\{ N_0^m - [\Gamma_0^m \beta_0^m + P_0^* \Pi_0^m]_{\Omega, E} \right\}. \quad (\text{D.35})$$

Se não houver mudanças na condição inicial do nuclídeo a eq.(D.34) pode ser utilizada, mas em geral, usa-se para este caso a eq.(D.35).

Tendo em mãos as equações adjuntas de queima para o caso quase-estático, é necessário encontrar a equação de decaimento, a equação para a forma do fluxo, e o vínculo de potência, e adicionalmente as devidas restrições como a ortogonalidade Γ_i^* com a fonte de fissão e a descontinuidade do nuclídeo adjunto $\hat{N}^*$, resumindo

$$\left[L^*(\hat{N}_i) - \lambda_i F^*(\hat{N}_i) \right] \Gamma_i^* = Q_i^* \quad \text{at} \quad t = t_i, \quad (\text{D.36})$$

$$P_i^* = \frac{\int_{t_i^+}^{t_{i+1}^-} \left[N^* [\psi_i R]_{E, \Omega} N \right]_V dt}{[\psi_i \sigma_f N_i]_{E, \Omega, V}} + \frac{\partial R}{\partial \Phi_i}, \quad (\text{D.37})$$

$$-\frac{\partial}{\partial t} \hat{N}^*(\hat{r}, t) = \hat{M}^*(\Phi_i, \psi_i) \hat{N}^*(\hat{r}, t) + \hat{C}(\hat{r}, t), \quad t \in (t_i, t_{i+1}),$$

$$\hat{N}^*(\hat{r}, t_i^-) = \hat{N}^*(\hat{r}, t_i^+) + [\Gamma_i^* \beta_i + P_i^* \Pi_i]_{\Omega, E}, \quad \text{at} \quad t = t_i, i \neq f,$$

$$\hat{N}^*(\hat{r}, t_f) \equiv \hat{N}_f(\hat{r}) = 0, \quad \text{at} \quad t = t_f. \quad (\text{D.38})$$

No limite como o comprimento do tempo vai a zero, o fluxo torna-se uma função contínua do tempo, e não há "jump condition" sobre o nuclídeo adjunto. Para este caso, se a aproximação do modo fundamental é feito pela forma espacial do fluxo, a dependência da energia é expressa através do formalismo de grupos, e os componentes de $\hat{N}$ são limitados em poucos isótopos importantes para a análise de reatores térmicos, então as equações se reduzem as equações derivadas por Harris [62], estas equações simplificam o sistema adjunto, com a fonte apropriada [68].

As equações adjuntas são previamente derivadas para um parâmetro integral arbitrário e um específico tipo de dado nuclear de interesse, em um tempo também específico. O tipo de parâmetro integral originalmente considerado por Gandini no formalismo desacoplado em depleção pontual como discutido anteriormente.

Sob estas suposições

$$R = R[\hat{N}_f, \hat{h}] = R[\hat{N}(\hat{r}, t)\delta(t - t_f), \hat{h}], \quad (\text{D.39})$$

ou seja, o parâmetro integral é uma delta de Dirac em $t = t_f$, neste caso a fonte adjunta é equivalente a condição final fixa, e as equações adjuntas são simplificadas

$$\hat{C}^*(r, t) = 0 \quad \text{para} \quad t < t_f, \quad (\text{D.40})$$

$$\hat{N}_f^* = \frac{\partial}{\partial \hat{N}_f} \quad \text{para} \quad t = t_f, \quad (\text{D.41})$$

$$\frac{\partial R}{\partial \Phi_i} = \frac{\partial R}{\partial \psi_i} = 0 \quad \text{para} \quad t = t_i. \quad (\text{D.42})$$

Se os valores das variáveis P_i^* e Γ_i^* são pequenos, isto é, o efeito da perturbação do fluxo é desprezível, então a descontinuidade em $\hat{N}^*$ em t_i será pequeno, e a equação do nuclídeo adjunto se reduz ao formalismo desacoplado.

Apêndice E

CINEW (New Code for Depletion and Sensibility Analysis)

O código desenvolvido durante este trabalho faz análise de queima, resolve a equação de Bateman e lineariza cadeias através do método de cadeias lineares. Este código se diferencia dos demais códigos utilizados em física de reatores pois além da concentração direta ele calcula a concentração adjunta e faz análise de sensibilidade utilizando o formalismo proposto neste trabalho.

As análises de decaimento são feitas utilizando cadeias completas e n grupos de energia, as seções de choque, e o fluxo de nêutrons são dados de entrada.

Em termos de poucos grupos de energia, a concentração do i^{th} nuclídeo em uma cadeia linear, como foi mostrado no capítulo 2, é determinada pela seguinte equação diferencial acoplada,

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_k y_i^k S^k + \alpha_{i-1} \gamma_{i-1} N_{i-1} - (\lambda_i + A_i^a) N_i, \quad (\text{E.1})$$

que possui solução analítica

$$N_n(t) = \sum_{m=1}^n \left[N_m(0) \sum_{j=m}^n \frac{e^{-(\lambda_j + A_j^a)\Delta t}}{\prod_{i=m \neq j}^n (\lambda_i + A_i^a - (\lambda_j + A_j^a))} \right]. \quad (\text{E.2})$$

Para um meio sem e com fonte teremos respectivamente,

$$\frac{dN_i}{dt} = \Gamma_i + \omega_{i-1}N_{i-1} - \eta_i N_i, \quad (\text{E.3})$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_k y_i^k S^k + \alpha_{i-1}\gamma_{i-1}N_{i-1} - \eta_i N_i, \quad (\text{E.4})$$

onde $\eta_i = (\lambda_i + A_i^a)$ e $\omega_{i-1} = \alpha_{i-1}\gamma_{i-1}$, sendo α e γ escolhidos de acordo com o acoplamento do precessor.

Considere a seguinte cadeia

$$N_1 \rightarrow N_2 \rightarrow N_3 \rightarrow N_i \quad (\text{E.5})$$

as equações para a cadeia acima podem ser escritas como

$$\frac{dN_1}{dt} = \Gamma_1 - \eta_1 N_1, \quad (\text{E.6})$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \Gamma_2 + \omega_1 N_1 - \eta_2 N_2, \quad (\text{E.7})$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \Gamma_3 + \omega_2 N_2 - \eta_3 N_3, \quad (\text{E.8})$$

$$\dots \quad (\text{E.9})$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \Gamma_i + \omega_{i-1}N_{i-1} - \eta_i N_i. \quad (\text{E.10})$$

Escrevendo as equações acima em sua forma matricial teremos,

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \eta_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \omega_1 & \eta_2 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \omega_2 & \eta_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \omega_{i-1} & \eta_i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ \vdots \\ \Gamma_i \end{pmatrix}. \quad (\text{E.11})$$

Após a devida transformação de variável de $s \rightarrow T_f - t$, sendo $ds = -dt$,

podemos escrever as equações adjuntas para a cadeia dada por (E.11)

$$\frac{dN_i^*}{ds} = \Gamma_i^* - \eta_i N_i^*, \quad (\text{E.12})$$

$$\frac{dN_{i-1}^*}{ds} = \Gamma_{i-1}^* + \omega_{i-1} N_i^* - \eta_{i-1} N_{i-1}^*, \quad (\text{E.13})$$

$$\frac{dN_{i-2}^*}{ds} = \Gamma_{i-2}^* + \omega_{i-2} N_{i-1}^* - \eta_{i-2} N_{i-2}^*, \quad (\text{E.14})$$

$$\frac{dN_1^*}{ds} = \Gamma_1^* + \omega_1 N_2^* - \eta_1 N_1^*. \quad (\text{E.15})$$

Que por sua vez possuem sua forma matricial

$$\frac{d}{ds} \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_i \end{pmatrix}^* = \begin{pmatrix} \eta_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \omega_1 & \eta_2 & \ddots & 0 & \vdots \\ 0 & \omega_2 & \eta_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \omega_{i-1} & \eta_i \end{pmatrix}^* \begin{pmatrix} N_1 \\ N_2 \\ N_3 \\ \vdots \\ N_i \end{pmatrix}^* + \begin{pmatrix} \Gamma_1 \\ \Gamma_2 \\ \Gamma_3 \\ \vdots \\ \Gamma_i \end{pmatrix}^* \quad (\text{E.16})$$

Para o caso particular sem fontes teremos as seguintes equações adjuntas,

$$\frac{dN_i^*}{ds} = -\eta_i N_i^*, \quad (\text{E.17})$$

$$\frac{dN_{i-1}^*}{ds} = \omega_{i-1} N_i^* - \eta_{i-1} N_{i-1}^*, \quad (\text{E.18})$$

$$\frac{dN_{i-2}^*}{ds} = \omega_{i-2} N_{i-1}^* - \eta_{i-2} N_{i-2}^*, \quad (\text{E.19})$$

$$\dots \quad (\text{E.20})$$

$$\frac{dN_1^*}{ds} = \omega_1 N_2^* - \eta_1 N_1^*. \quad (\text{E.21})$$

Após o procedimento mostrado no apêndice B, teremos a seguinte solução para

a equação de decaimento adjunta,

$$\tilde{N}_{i-n}^* = \sum_{k=i}^{i-n} N_{T_f k 0}^* \left(\prod_{m=k-1}^{i-n} \omega_m \right) \sum_{l=k}^{i-n} \frac{e^{-\eta_l(T_f-t)}}{\prod_{j=k \neq l}^{i-n} (\eta_j - \eta_l)}. \quad (\text{E.22})$$

Sendo $N-i = p$ e $N-p = i$ e p é um elemento da cadeia, e eq.(E.22) é reescrita como,

$$\tilde{N}_p^* = \sum_{k=N}^p N_{T_f 0}^* \left(\prod_{m=k-1}^p \omega_m \right) \sum_{l=k}^p \frac{e^{-\eta_l(T_f-t)}}{\prod_{j=k \neq l}^p (\eta_j - \eta_l)}. \quad (\text{E.23})$$

E para $k = p$

$$\tilde{N}_p^* = \sum_{k=p}^N N_{T_f k 0}^* \left(\prod_{m=k-1}^p \omega_m \right) \sum_{l=k}^p \frac{e^{-\eta_l(T_f-t)}}{\prod_{j=k \neq l}^p (\eta_j - \eta_l)}, \quad (\text{E.24})$$

sendo $N_{T_f k 0}^* = \delta_{Nk}$,

$$\tilde{N}_p^* = \left(\prod_{n=N-1}^p \omega_n \right) \sum_{l=N}^p \frac{e^{-\eta_l(T_f-t)}}{\prod_{j=N \neq l}^p (\eta_j - \eta_l)}. \quad (\text{E.25})$$

Dessa maneira a equação direta para (E.25) é escrita da seguinte forma,

$$N_p = \sum_{m=1}^p \left[\left[\prod_{k=m}^{p-1} \omega_k \right] N_m(0) \sum_{h=m}^p \frac{e^{-\eta_h t}}{\prod_{i=m \neq j}^p (\eta_i - \eta_h)} \right]. \quad (\text{E.26})$$

A equação para o coeficiente de sensibilidade proposto pelo formalismo mostrado neste trabalho é dado pela eq.(3.35),

$$S_k = \frac{\alpha_k}{R} \left(\frac{\partial \hat{N}}{\partial \alpha_k} + \sum_i \int_{t_i^+}^{t_{i+1}^+} N^*(\hat{r}, t) \frac{\partial}{\partial \alpha(r, E)} M_i N(\hat{r}, t) dt \right), \quad (\text{E.27})$$

para resolver a integral dessa equação fazamos primeiro $N_p \tilde{N}_p^*$,

$$N_p \tilde{N}_p^* = \left(\prod_{n=N-1}^p \omega_n \right) \sum_{m=1}^p \left[\left[\prod_{k=m}^{p-1} \omega_k \right] N_m(0) \sum_{h=m}^p \sum_{l=N}^p \frac{1}{\prod_{j=N \neq l}^p (\eta_j - \eta_l)} \frac{1}{\prod_{i=m \neq j}^p (\eta_i - \eta_h)} e^{-\eta_l(T_f-t)} e^{-\eta_h t} \right] \quad (\text{E.28})$$

onde a integral $\int_0^{t_F} e^{-\eta_l(T_f)} e^{-(\eta_h - \eta_l)t} dt$ tem a seguinte soluão

$$\int_0^{t_F} e^{-\eta_l(T_f - t)} e^{-\eta_h t} dt = \begin{cases} \frac{[e^{-\eta_l T_f} - e^{-\eta_h T_f}]}{(\eta_h - \eta_l)}, & \text{se } h \neq l \\ e^{-\eta_l(T_f)} t_F, & \text{se } h = l \end{cases} \quad (\text{E.29})$$

Entrada de dados usados para o MCNP

137


```

29      ( 5      ):
30      ( -5 4 -7 ):
31      ( -5 4 6 )
32      u=2 imp:n=1
33 c
34 c -----/
35 7      3      7.08108E-02
36      9 -8 11 -10
37      lat=1 fill=-8:7 -8:7 0:0
38      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
39      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
40      1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1
41      1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1
42      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
43      1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1
44      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
45      1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1
46      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1
47      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
48      1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1
49      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
50      1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1
51      1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1
52      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
53      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
54      u=3 imp:n=1
55 c
56 c -----/
57 c
58 8      3      7.08108E-02
59      13 -12 15 -14
60      fill=3 ( -0.616 -0.616 0.0 )
61      u=4 imp:n=1
62 c
63 9      3      7.08108E-02
64      (-13      ):
65      ( 12      ):
66      ( 13 -12 -15 ):
67      ( 13 -12 14 )
68      u=4 imp:n=1

```



```

109 c -----MATERIALS-----
110 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
111 c
112 c ccccccccccccccccccccccc
113 c pastilhas - UO2 c
114 c ccccccccccccccccccccccc
115 c
116 c UO2 ( 3% em U-235 ) -> rho = 10.3 [g/c.c]
117 c n = 6.89307E-02 [at./barn/cm]
118 c
119 m1 92234.70c 5.84302E-06
120 92235.70c 6.89307E-04
121 92238.70c 2.22817E-02
122 8016.70c 4.59538E-02
123 c
124 c ccccccccccccccccccccccc
125 c zircaloy -4 c
126 c ccccccccccccccccccccccc
127 c
128 c n = 4.32506E-02 [at./barn/cm]
129 c
130 m2 40090.70c 2.18875E-02
131 40091.70c 4.77313E-03
132 40092.70c 7.29583E-03
133 40094.70c 7.39368E-03
134 40096.70c 1.19116E-03
135 50112.70c 4.68066E-06
136 50114.70c 3.18478E-06
137 50115.70c 1.64064E-06
138 50116.70c 7.01616E-05
139 50117.70c 3.70592E-05
140 50118.70c 1.16872E-04
141 50119.70c 4.14504E-05
142 50120.70c 1.57212E-04
143 50122.70c 2.23417E-05
144 50124.70c 2.79392E-05
145 26054.70c 8.61631E-06
146 26056.70c 1.36256E-04
147 26057.70c 3.26825E-06
148 26058.70c 4.15960E-07

```

```

149      24050.70 c    3.30124E-06
150      24052.70 c    6.36611E-05
151      24053.70 c    7.21866E-06
152      24054.70 c    1.79688E-06
153      72174.70 c    3.58559E-09
154      72176.70 c    1.15226E-07
155      72177.70 c    4.11812E-07
156      72178.70 c    6.04173E-07
157      72179.70 c    3.01655E-07
158      72180.70 c    7.76879E-07
159 c  ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
160 c
161 m66      92235.70 c  1.0
162 m77      92238.70 c  1.0
163 m88      11023.70 c  1.0
164 m99      92236.70 c  1.0
165 m111     92234.70 c  1.0
166 m222     92239.70 c  1.0
167 m333     94239.70 c  1.0
168 m444     94240.70 c  1.0
169 m555     94241.70 c  1.0
170 m666     94238.70 c  1.0
171 c
172 c  ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
173 c  agua + B                      c
174 c  ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
175 c
176 c    n =  7.08108E-02 [at./barn/cm]
177 c
178 m3      8016.70C    2.35820E-02
179      1001.70C    4.71641E-02
180      5010.70C    1.28795E-05
181      5011.70C    5.18417E-05
182 mt3     lwtr.10 t
183 c
184 c
185 c  ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
186 c
187 kcode    100000 1.02 50 1000
188 c

```

```

189 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
190 c
191 c SOURCE CARDS
192 c
193 sdef      pos= 0.0 0.0 0 $ center vol. source
194          axs= 0 0 1      $ axis vol source
195          rad d1          $ radial - distributions 1
196          ext d2          $ axial - distributions 2
197          erg d3          $ energy - distributions 3
198 si1       h   0 15      $ radi vol. source
199 sp1 -21 1
200 si2       h -30 30      $ extension of cylinder
201 sp3       -3            $ Watt spectrum
202 c
203 c
204 c
205 c ccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccccc
206 c
207 c
208 c
209 f4:n 1
210 fc4 NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
211 fm4 (1.0)          $ F = flux
212     (1.0 66 102) $ IXSCAP = flux * cross section cap
213     (1.0 66 1)  $ IXSTOT = flux * cross section tot
214     (1.0 66 18) $ IXSFIS = flux * cross section fis
215     (1.0 66 16) $ IXSN2N = flux * cross section n2n
216 E4 0.625E-6 5.53E-3 8.21E-2 15.0 $Energy Groups
217 c
218 c
219 c
220 f14:n 1
221 fc14 NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
222 fm14 (1.0)          $ F = flux
223     (1.0 77 102) $ IXSCAP = flux * cross section cap
224     (1.0 77 1)  $ IXSTOT = flux * cross section tot
225     (1.0 77 18) $ IXSFIS = flux * cross section fis
226     (1.0 77 16) $ IXSN2N = flux * cross section n2n
227 E14 0.625E-6 5.53E-3 8.21E-2 15.0 $Energy Groups
228 c

```

```

229 c
230 c
231 f24:n 1
232 fc24 NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
233 fm24 (1.0) $ F = flux
234 (1.0 88 102) $ IXSCAP = flux * cross section cap
235 (1.0 88 1) $ IXSTOT = flux * cross section tot
236 (1.0 88 18) $ IXSFIS = flux * cross section fis
237 (1.0 88 16) $ IXSN2N = flux * cross section n2n
238 E24 0.625E-6 5.53E-3 8.21E-2 15.0 $Energy Groups
239 c
240 c
241 c
242 f34:n 1
243 fc34 NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
244 fm34 (1.0) $ F = flux
245 (1.0 99 102) $ IXSCAP = flux * cross section cap
246 (1.0 99 1) $ IXSTOT = flux * cross section tot
247 (1.0 99 18) $ IXSFIS = flux * cross section fis
248 (1.0 99 16) $ IXSN2N = flux * cross section n2n
249 E34 0.625E-6 5.53E-3 8.21E-2 15.0 $Energy Groups
250 c
251 c
252 c
253 f44:n 1
254 fc44 NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
255 fm44 (1.0) $ F = flux
256 (1.0 111 102) $ IXSCAP = flux * cross section cap
257 (1.0 111 1) $ IXSTOT = flux * cross section tot
258 (1.0 111 18) $ IXSFIS = flux * cross section fis
259 (1.0 111 16) $ IXSN2N = flux * cross section n2n
260 E44 0.625E-6 5.53E-3 8.21E-2 15.0 $Energy Groups
261 c
262 c
263 c
264 f54:n 1
265 fc54 NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
266 fm54 (1.0) $ F = flux
267 (1.0 222 102) $ IXSCAP = flux * cross section cap
268 (1.0 222 1) $ IXSTOT = flux * cross section tot

```

```

269      (1.0 222 18)  $ IXSFIS = flux * cross section fis
270      (1.0 222 16)  $ IXSN2N = flux * cross section n2n
271 E54 0.625E-6  5.53E-3  8.21E-2  15.0 $Energy Groups
272 c
273 c
274 c
275 f64:n 1
276 fc64  NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
277 fm64  (1.0)          $ F    = flux
278      (1.0 333 102)  $ IXSCAP = flux * cross section cap
279      (1.0 333 1)   $ IXSTOT = flux * cross section tot
280      (1.0 333 18)  $ IXSFIS = flux * cross section fis
281      (1.0 333 16)  $ IXSN2N = flux * cross section n2n
282 E64 0.625E-6  5.53E-3  8.21E-2  15.0 $Energy Groups
283 c
284 c
285 c
286 f74:n 1
287 fc74  NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
288 fm74  (1.0)          $ F    = flux
289      (1.0 444 102)  $ IXSCAP = flux * cross section cap
290      (1.0 444 1)   $ IXSTOT = flux * cross section tot
291      (1.0 444 18)  $ IXSFIS = flux * cross section fis
292      (1.0 444 16)  $ IXSN2N = flux * cross section n2n
293 E74 0.625E-6  5.53E-3  8.21E-2  15.0 $Energy Groups
294 c
295 c
296 c
297 f94:n 1
298 fc94  NORMALIZED TO VOLUME FLUX AND CROSS SECTIONS
299 fm94  (1.0)          $ F    = flux
300      (1.0 555 102)  $ IXSCAP = flux * cross section cap
301      (1.0 555 1)   $ IXSTOT = flux * cross section tot
302      (1.0 555 18)  $ IXSFIS = flux * cross section fis
303      (1.0 555 16)  $ IXSN2N = flux * cross section n2n
304 E94 0.625E-6  5.53E-3  8.21E-2  15.0 $Energy Groups
305 c
306 c
307 c
308 f104:n 1

```

[illegible]

Apêndice G

Entrada de dados usados para o SERPENT

```
1 %
2 % vareta
3 % -----/
4 cell 1    1 UO2.30 -1 7 -6      % pastilhas - UO2
5 cell 2    1 void   -2 1  7 -6   % Gap - He
6 cell 3    1 Zir4   -3 2  7 -6   % Encamisamento - Zircaloy -4
7 cell 4_1  1 H2OB    3           % Refrigerante - Agua leve
8 cell 4_2  1 H2OB   -3 -7
9 cell 4_3  1 H2OB   -3  6
10 %
11 % Guia de controle e de instrumentação
12 % -----/
13 cell 5    2 Zir4   -5 4 7 -6   % Guia - Zircaloy -4
14 cell 6_1  2 H2OB   -4           % Refrigerante - Agua leve
15 cell 6_2  2 H2OB    5
16 cell 6_3  2 H2OB  -5 4 -7
17 cell 6_4  2 H2OB  -5 4  6
18 %
19 % Arranjo
20 % -----/
21 lat 3 1 0.0 0.0 16 16 1.232
22      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
23      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
24      1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1
25      1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1
```

```

26      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
27      1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1
28      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
29      1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 1 1 1 1 1
30      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 2 1 1 1
31      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
32      1 1 2 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 2 1 1
33      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
34      1 1 1 2 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1
35      1 1 1 1 1 2 1 1 1 1 2 1 1 1 1 1
36      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
37      1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1

```

```
38 %
```

```
39 % Elemento
```

```
40 % -----/
```

```
41 cell 7 0 fill 3 -16
```

```
42 cell 8 0 outside 16
```

```
43 %
```

```
44 % Superfícies
```

```
45 % -----/
```

```
46 surf 1 cyl 0.0 0.0 0.4025
```

```
47 surf 2 cyl 0.0 0.0 0.4110
```

```
48 surf 3 cyl 0.0 0.0 0.4750
```

```
49 surf 4 cyl 0.0 0.0 0.5525
```

```
50 surf 5 cyl 0.0 0.0 0.5980
```

```
51
```

```
52 surf 6 pz 182.90
```

```
53 surf 7 pz -182.90
```

```
54
```

```
55 surf 8 px 0.616
```

```
56 surf 9 px -0.616
```

```
57 surf 10 py 0.616
```

```
58 surf 11 py -0.616
```

```
59
```

```
60 surf 12 px 9.856
```

```
61 surf 13 px -9.856
```

```
62 surf 14 py 9.856
```

```
63 surf 15 py -9.856
```

```
64
```

```
65 surf 16 sqc 0.0 0.0 9.856 0.0
```

```

66
67 surf 999 sph 0.0 0.0 0.0 200.00
68 %
69 % Tabela de nuclÃ deos
70 % -----/
71
72 % T=1266.0 K
73 mat UO2_30 6.89307E-02 burn 1 vol 43750.23568
74      92234.12 c 5.84302E-06
75      92235.12 c 6.89307E-04
76      92238.12 c 2.22817E-02
77      8016.12 c 4.59538E-02
78 % T=583.0 K
79 mat Zir4 4.32506E-02
80      40090.06 c 2.18875E-02
81      40091.06 c 4.77313E-03
82      40092.06 c 7.29583E-03
83      40094.06 c 7.39368E-03
84      40096.06 c 1.19116E-03
85      50112.06 c 4.68066E-06
86      50114.06 c 3.18478E-06
87      50115.06 c 1.64064E-06
88      50116.06 c 7.01616E-05
89      50117.06 c 3.70592E-05
90      50118.06 c 1.16872E-04
91      50119.06 c 4.14504E-05
92      50120.06 c 1.57212E-04
93      50122.06 c 2.23417E-05
94      50124.06 c 2.79392E-05
95      26054.06 c 8.61631E-06
96      26056.06 c 1.36256E-04
97      26057.06 c 3.26825E-06
98      26058.06 c 4.15960E-07
99      24050.06 c 3.30124E-06
100     24052.06 c 6.36611E-05
101     24053.06 c 7.21866E-06
102     24054.06 c 1.79688E-06
103     72174.06 c 3.58559E-09
104     72176.06 c 1.15226E-07
105     72177.06 c 4.11812E-07

```

```

106      72178.06c    6.04173E-07
107      72179.06c    3.01655E-07
108      72180.06c    7.76879E-07
109 % T=583.0 K
110 mat H2OB    7.08108E-02
111      8016.06c    2.35820E-02
112      1001.06c    4.71641E-02
113      5010.06c    1.28795E-05
114      5011.06c    5.18417E-05
115 therm lwtr lwe7.06t % lei de espalhamento para agua leve.
116
117 % — Cross section data library file path:
118
119 set acelib "/home/serpent2/xs/sss_endfb7u.xsdata"
120 set declib "/home/serpent2/xs/sss_endfb7.dec"
121 set nfylib "/home/serpent2/xs/sss_endfb7.nfy"
122
123 % — Reflective boundary condition:
124 set bc 3
125 % — burn options:
126
127 dep daytot 0.1 0.2 0.3 0.50 1 2 3 5 10 20 30 60 90 120
128
129 % — Isotope list for inventory calculation:
130 set inventory
131 922340
132 922350
133 922360
134 922380
135 932370
136 942380
137 942390
138 942400
139 942410
140 942420
141 952410
142 952430
143 621470
144 621490
145 621500

```

```
146 621510
147 621520
148 601430
149 601450
150 631530
151 641550
152 541260
153 561330
154 541280
155 541290
156 541300
157 541310
158 541320
159 541330
160 541360
161 541340
162 541350
163
164 set printm 1
165
166 % — group constant generation:
167
168 % universe = 0 (homogenization over all space)
169 % symmetry = 4
170 % 4-group structure (3 group boundaries)
171
172 % set gcu 0
173 % set sym 4
174 % set nfg 4 0.625E-6 5.5E-3 0.821
175
176 % — Neutron population and criticality cycles:
177
178 set pop 10000 500 100
179
180 % — Geometry and mesh plots:
181
182 % yz
183 % plot 1 1000 1000 0 -100 100 -50 -50
184 % xz
185 % plot 1 1000 1000 0.616 -150 150 -150 150
```

```

186 % plot 2 1000 1000 0.616 -150 150 -150 150
187 % plot 3 1000 1000 0 -9.856 9.856 -9.856 9.856
188 % xy
189 % plot 3 1000 1000 -1 -4 4 -4 4
190
191 % yz
192 % plot 1 1000 1000
193 % xz
194 % plot 2 1000 1000
195 % xy
196 % plot 3 1000 1000
197
198 % yz
199 % mesh 1 1000 1000 0 -10 10 -100 100
200 % xz
201 % mesh 2 1000 1000 0 -10 10 -100 100
202 % xy
203 % mesh 3 1000 1000 0 -10 10 -10 10
204
205 % mesh 3 1000 1000 0 -9.856 9.856 -9.856 9.856
206
207
208 % — Total power for normalization:
209
210 set power 14.8703E6
211
212 % — optimization
213
214 set opti 1
215
216 % — Detector energy grid (group 0 - 1 bin , 1E-11 MeV < E <= ):
217 % (group 1 - 1 bin , 0.625E-6 MeV < E <= 5.53E-3 MeV ):
218 % (group 2 - 1 bin , 5.53E-3 MeV < E <= 0.862 MeV ):
219 % (group 3 - 1 bin , 0.862 MeV < E <= 100 MeV ):
220
221 % ene 1 1 1E-11 0.625E-6 5.53E-3 0.862 100
222
223 % — Average flux:
224
225 % det 1

```

```
226 % de 1          % Use energy grid 1
227 % dv 13.824
228 % dx -120 120 100
229 % dy -120 120 100
230 % dz -120 120 100
231
232 % — Average flux
233
234 % det 2
235 % de 1          % Use energy grid 1
236 % dv 1382.4
237 % dx -120 120 100
238 % dy -120 120 100
```


Referências Bibliográficas

- [1] D. M. Hamby. A review of sensitivity analysis techniques. *Oak Ridge National Laboratory*, CONF-811103-59, 1981. [2](#)
- [2] E. M. Oblow. Sensitivity theory from a differential view point. *Nuclear Science and Engineering*, 59:187–189, 1976. [3](#), [6](#), [25](#), [37](#)
- [3] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1965. [5](#)
- [4] E.P.Wigner. Effect of Small Perturbations on Pile Period. *Chicago Report CP-G-3048*; see also *The Collected Works of Eugene Paul Wigner, Part A.*, 1945. [5](#), [30](#), [105](#)
- [5] L. N. Usachev. Perturbation theory for the breeding ratio and for other number ratios pertaining to various reactor processes. *Journal of Nuclear Energy, Parts A/B*, 18:571–583, 1964. [5](#)
- [6] A. Gandini. A generalized perturbation method for bilinear functionals of the real and adjoint neutron fluxes. *Journal of Nuclear Energy*, 21:755–765, 1967. [5](#), [7](#), [31](#)
- [7] W. M. Stacey Jr. Variational methods in nuclear reactor physics. *Nuclear Science and Engineering*, 48:444–458, 1972. [5](#), [32](#)
- [8] E. Greenspan. Developed in perturbation theory. *Advances in Nuclear Science and Technology*, 9, 1976. [5](#)
- [9] A. Santos. *Differential Approach to Sensitivity Analysis*. PhD thesis, University of Wisconsin, 1984. [6](#), [9](#), [16](#), [36](#), [38](#)
- [10] J. Cetnar. General solution of bateman equations for nuclear transmutation. *Annals of Nuclear Energy*, 33:640–645, 2006. [6](#), [12](#)
- [11] G. I. Bell and Glasstonel. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand-Reinhold, 1970. [6](#), [12](#), [14](#)

- [12] E. M. Oblow. Reactor cross section sensitivity studies using transport theory. *Oak Ridge National Laboratory*, ORNL - TM -4437, 1974. [6](#)
- [13] P. E. Hemming, J. Lewellen, and V. Lowery. *Transactions of the American Nuclear Society*, 18:335, 1974. [6](#)
- [14] H. H. Hummel and W. M. Stacey. *Nuclear Science and Engineering*, 54:35, 1974. [6](#)
- [15] D. E. Bartine, E. M. Oblow, and F. R. Mynatt. *Nuclear Science and Engineering*, 55:147, 1974. [6](#)
- [16] T. Wu. *Application of Sensitivity and Uncertainty Analysis in Fusion Reactor Desing*. PhD thesis, University of Wiscosin, 1981. [6](#)
- [17] A. A. Borges. Uma combinação entre os métodos diferencial e da teoria da perturbação para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade. Master's thesis, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1998. [6](#), [29](#), [62](#)
- [18] M. L. Williams. Perturbation and sensitivity theory for reactor burnup analysis. *Oak Ridge National Laboratory*, ORNL/TM-7096, 1979. [6](#), [7](#), [9](#), [16](#), [38](#), [43](#), [52](#)
- [19] A. Gandini. Time-dependent generalized perturbation methods for burn-up analysis. Technical Report RT/FI(75)4, Cominatio Nazionale per l'Energia Nucleare, Rome, Italy, 1975. [6](#), [31](#), [34](#)
- [20] L. Tondinelli. Sensitivity for actinide concentration during burnup with respect to nuclear data. Technical Report RT/FI(76)4, Cominatio Nazionale per l'Energia Nucleare, Rome, Italy, 1976. [7](#)
- [21] M. Williams and C. Weisbein. Sensitivity an uncertainty analysis for functional of the time-dependent nuclide field. *Oak Ridge National Laboratory*, ORNL-5593 (ENDF-263), 1978. [7](#), [34](#), [35](#)
- [22] J. Kallfelz, G. B. Bruna, and G. Palmiotti. *Nuclear Science and Engineering*, 62:304, 1977. [7](#), [35](#)
- [23] H. Bateman. Solution of a system of differential equations occurring in the theory of radioactive transformations. *Math. Proc. Cambridge*, 15:423–427, 1910. [7](#), [12](#), [21](#)
- [24] D. R. Harris and M.Becker. *Transactions of the American Nuclear Society*, 23:534, 1976. [7](#)

- [25] E. Greenspan, M. L. Williams, and J. R. Marable. Time dependent generalized perturbation theory for coupled neutron- nuclide problems. *Nuclear Science and Engineering*, 73:210, 1980. 8
- [26] G. Aliberti, G. Palmiotti, M. Salvatores, and C. G. Stenberg. *Nuclear Science and Engineering*, 146:13–50, 2004. 8
- [27] J. C. Levéfre, C. H. Mitchell, and G. Hubert. *Nuclear Science Engineering and Design*, 162:133–143, 1996. 8
- [28] S. Das. *Nuclear Science and Engineering*, 122:344–358, 1996. 8
- [29] G. I. Bell and S. Glasstone. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold Company, 1970. 8
- [30] J. R. Lamarsh. *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 1966. 8, 41
- [31] G. Aliberti G. Palmiotti, M. Salvatores. A parallel wavefront algorithm for efficient biological sequence comparison. In *4th Workshop on Neutron Measurements, Evaluations and Applications - Nuclear data needs for Generation IV and accelerator driven systems*, pages 105–112. Publ. Off. of the Europ. Union, 2008. 8
- [32] K. R. Elam and B. T. Rearden. *Nuclear Science and Engineering*, 145:196–212, 2003. 8
- [33] H. J. Shim and C. H. Kim. Real variance estimation im monte carlo wielandt calculations. In *PHYSOR*, pages 14–19, 2008. 8
- [34] D. M. Hamby. A comparison of sensitivity analysis techniques. *Health Physics*, 68:195–204, 1995. 8
- [35] M. Pusa. *Numerical methods for nuclear fuel burnup calculation*. PhD thesis, VTT Technical Research Centre of Finland, 2013. 8, 20, 99
- [36] J. Leppänen. *PSG2/Serpent-A continuous-Energy Monte Carlo Reactor Physics Burnup Calculation Code*, November 2008. VTT Technical Research Centre of Finland. 20, 21, 99
- [37] F. R. Gantmacher. *The Theory of Matrices*. Chelsea Publishing Company, 1960. 20

- [38] T. R. Englan and W. B. Wilson and M. G. Stamaletos. *Fission Products for Thermal Reactors, Part 2: Users manual for EPRI-CINDER Code and Data*, Dec 1996. EPRI NP-356 . 20, 21, 79
- [39] J. Cetnar and P. Gronek. *BISON-C Upgraded One-Dimensional Transport and Burnup Calculation Code for Unix System*, 1997. INT271/I. 21
- [40] K. Furuta and Y. Oka and S. Kondo. *BISON 1.5 A dimensional transport and burnup calculation code*, February 1987. UTNL-R 203 . 21
- [41] J. Cetnar and P. Gronek. Bison-c one dimensional transport and burnup calculation code with consideration of actinideos and fission products. *Nuclear Science and Engineering*, NSENAO 134 (2):236, 2000. 21
- [42] A. G. Croff. *A User's Manual for the ORIGEN2 Computer Code*, 1980. ORNL/TM-7157. 21
- [43] J. Lewis. The time dependent importance of neutrons and precursors. *Nuclear Science and Negineering*, 7:268-274, 1960. 21, 31
- [44] M. L. Williams. *Nuclear Science and Engineering*, 70:20, 1979. 25, 29, 36, 41, 56, 58, 59
- [45] G. Chiba, K. Okumura, A. Oizumi, and M. Saito. Sensitivity analysis of fission product concentrations for light water reactor burned fuel. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 47(7), 2010. 27, 31
- [46] R. Smith. *Variational Methods in Optimization*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, 1974. 28
- [47] A. Gandini. Generalized perturbation theory for nonlinear systems from the importance conservation principle. *Nuclear Science and Engineering*, 77:316-343, 1981. 30, 32
- [48] H. Soodak. *The Science and engineering of Nuclear Power*. united Nations, New York, 1948. 31
- [49] L. N. Usachev. Equation for the importance of neutrons, reactor kinetics and the theory of perturbation in proceed. In *First International Conference on the Peaceful Uses of Enegy*, volume 5, United Nations, 1955. 31
- [50] F. Reventós, L. Batet, M. Pérez, A. Guba, I. Toth, T. Mieusset, P.Bazin, A. de Greycand S. Borisov, T. Skorek, H. Glaeser, J. Joucla, P. Probst, A. Ui, B. D. Chung, R. Pernica,

- M. Kyncl, A. Manera, J. Freixa, F.D'Auria, A. Petruzzi, and A. del Nevo. Bemuse phase v report uncertainty and sensitivity analysis of a lbloca in zion nuclear power plant. Technical Report NEA/CSNI R (2009) 13, OECD/NEA Report, Pisa, Italy, 2009. 31
- [51] J. Lewis. *Importance, the Adjoint Function*. Pergamon Press, Oxford, 1965. 32
- [52] G. pomraning. Variational principle for eigenvalue equations. *Journal of Mathematical Physics*, 8:149–160, 1967. 32
- [53] E. Greenspan, D. Gilai, and E. M. Oblo. Second order generalized perturbation theory for source-driven systems. *Nuclear Science and Engineering*, 68:1–8, 1978. 32
- [54] Y. Seki. *Journal of Mathematical Physics*, 133:199, 1972. 32
- [55] Y. Ronen. A note on the adjoint function in time dependent reactor theory. *Annals of Nuclear Science and Engineering*, 1:513–515, 1974. 32
- [56] M. Komata. A generalized perturbation theory applicable to reactor boundary changes. *Nuclear Science and Engineering*, 64:811–822, 1971. 32
- [57] E. M. Oblo. Sensitivity theory for reactor thermal-hydraulics problems. *Nuclear Science and Engineering*, 68, 1978. 32
- [58] M. Becker. *The Principles and Applications of Variational Methods*. Cambridge Press, 1974. 32
- [59] D. G. Cacuci, C. F. Weber, E. M. oblo, and J. H. Marable. Sensitivity theory for general systems of nonlinear equations. *Nuclear Science and Engineering*, 75:1:88–110, 1980. 32
- [60] B. L. Broadhead, C. M. Hopper, and R. L. Child. Sensitivity and uncertainty analyses applied to criticality safety validation. *Oak Ridge National Laboratory*, ORNL/TM-13692/V1, 1999. 32
- [61] R. L. Childs B. L. Broadhead, C. M. Hooper and C. V. Parks. Sensitivity and uncertainty analyses applied to criticality safety validation. Technical Report CR-6655, vol.1, Oak Ridge National Laboratory, EUA, 1999. 33
- [62] D. H. Harris. *Sensitivity of Nuclear Fuel Cycle Costs to Uncertainties in Data and Methods*. PhD thesis, Rensselaer Polytechnic Instituten, 1976. 34, 130

- [63] L. Tondinelli. Sensitivity for actinide concentration during burnup with respect to nuclear data. Technical Report RT/FI(76)4, Comitato Nazionale per l'Energia Nucleare, Rome, Italy, 1976. [35](#)
- [64] J. A. Perrota. *Proposta de um núcleo de reator PWR avançado com características adequadas para o conceito de segurança passiva*. PhD thesis, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, 1999. [69](#)
- [65] D. B. Pelowitz. *Mcnpx users manual, version 2.6. 0*. Los Alamos National Laboratory, 2005. Los Alamos National Laboratory. [70](#)
- [66] A. Gandini. *Métodos Perturbativos para a Análise de Reatores Nucleares*. ENEA, Rio de Janeiro, 1982. [75](#)
- [67] H. Etherington. *Nuclear Engineering Handbook*. McGraw-Hill Book Company, INC, 1958. [96](#)
- [68] M. L. Williams, J. R. White, J. H. Marable, and E. M. Oblo. Sensitivity theory for depletion analysis. In *Seminar-Workshop on the Theory and Application of Sensitivity and Uncertainty Analysis Oak Ridge, Tennessee, ORNL/RSIC-42*, United Nations, 1978. [130](#)

Índice Remissivo

análise

de sensibilidade, [25](#)

transmutação, [9](#)

aplicação

PWR, [69](#)

aplicações

método proposto, [41](#)

aproximação

quase-estática, [16](#)

casos

exemplos, [52](#)

coeficientes

sensibilidade da produção do ^{239}Pu , [82](#)

sensibilidade da razão de conversão, [96](#)

combustível

especificações, [70](#)

equação

adjuntas, [33](#)

decaimento, [22](#)

transmutação, [12](#), [19](#)

método

da teoria da perturbação generalizada, [30](#)

diferencial, [26](#)

matriz exponencial, [117](#)

proposto, [36](#), [62](#)