

INSTITUTO DE ENGENHARIA NUCLEAR

JOSÉ RAFAEL NICOLAO CARNEIRO

**ESTUDO NUMÉRICO DA SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA
ESPACIAL PARA TRANSIENTES EM REATORES SUBCRÍTICOS (ADS)
MULTIDIMENSIONAIS**

**Rio de Janeiro
2020**

JOSÉ RAFAEL NICOLAO CARNEIRO

**ESTUDO NUMÉRICO DA SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA
ESPACIAL PARA TRANSIENTES EM REATORES SUBCRÍTICOS (ADS)
MULTIDIMENSIONAIS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Nucleares do Instituto de Engenharia Nuclear da Comissão Nacional de Engenharia Nuclear como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Grau de Mestre em Ciência e Tecnologia Nucleares.

Orientadores: Prof. Dr. Zelmo Rodrigues de Lima (PPGCTN/IEN/CNEN) e
Prof. Dr. Alessandro da Cruz Gonçalves (PEN/COPPE/UFRJ)

Rio de Janeiro
2020

CARN, Nicolao Carneiro, José Rafael

Estudo Numérico da Solução das Equações da Cinética Espacial para Transientes em Reatores Subcríticos (ADS) Multidimensionais / José Rafael Nicolao Carneiro: CNEN/IEN, 2020.

xi, 60f. : il. ; 31cm

Orientadores: Zelmo Rodrigues de Lima e Alessandro da Cruz Gonçalves.

Dissertação (Mestrado em Ciência e Tecnologia Nucleares) – Instituto de Engenharia Nuclear, PPGIEN, 2020

1. Cinética Espacial. 2. ADS. 3. Núcleo Subcrítico. 4. Acelerador de Partículas. 5. Transientes.

**ESTUDO NUMÉRICO DA SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA
ESPACIAL PARA TRANSIENTES EM REATORES SUBCRÍTICOS (ADS)
MULTIMENSIONAIS**

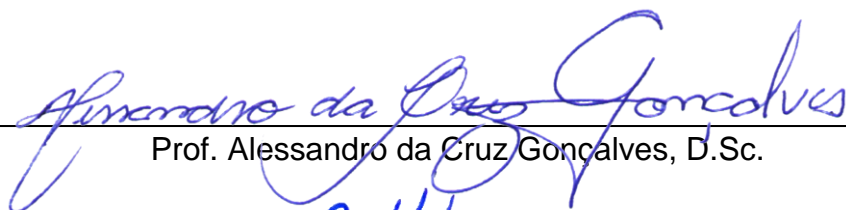
JOSÉ RAFAEL NICOLAO CARNEIRO

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES DO INSTITUTO DE ENGENHARIA
NUCLEAR DA COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR COMO
PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE
MESTRE EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA NUCLEARES.

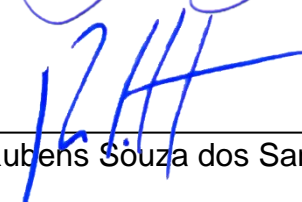
Aprovada por:



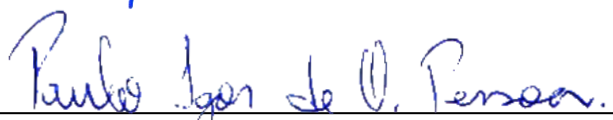
Prof. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc.



Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves, D.Sc.



Prof. Rubens Souza dos Santos, D.Sc.



Prof. Paulo Igor de Oliveira Pessoa, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
SETEMBRO DE 2020

“Educação não transforma o mundo. Educação muda as pessoas.
Pessoas transformam o mundo.”

Paulo Freire

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, minha irmã e a todos os meus avôs, meu maior agradecimento, por acreditarem em mim, me incentivarem em todos os momentos e por terem contribuído tanto na minha formação individual e também acadêmica.

Um agradecimento especial para os amigos da melhor equipe do Reator Argonauta, Jonathan, Alessandro, Anderson, Carlos e a Carlinha que dividiram comigo muitos bons momentos no instituto e muito trabalho, além dos antigos amigos da graduação que foram muito importantes nessa jornada, Alex, Jorjão e toda a turma de 2018 do mestrado.

Um agradecimento especial também para o professor Zelmo R. de Lima, pela oportunidade de estudar uma tecnologia promissora e por toda ajuda, ao professor Rubens S. dos Santos, por todas valiosas aulas, ao professor Cesar Salgado., por toda paciência durante as aulas, ao professor e coordenador Carlos Alexandre. e a dona Claudia pelo acolhimento.

E por todo suporte da CNEN e da Coordenação do PPGCTN do IEN que tornaram todos os estudos e a pesquisa possíveis.

RESUMO

O Sistema Dirigido por Acelerador, Accelerator-Driven System (ADS), pertence à nova geração de reatores avançados em desenvolvimento que prometem reduzir drasticamente a vida útil dos rejeitos radioativos, por exemplo, pelo processo de transmutação. Projetos de reatores subcríticos do tipo ADS têm atraído à atenção mundial e são objeto de pesquisa e desenvolvimento em vários países. O objetivo deste trabalho foi simular transientes associados à ADS em geometria tridimensional. Foi adotado o modelo de difusão de nêutrons que conduziu as equações de cinética espacial. Essas equações foram discretizadas espacialmente pelo conhecido método numérico de diferenças finitas e a dependência temporal foi resolvida pelo método de Euler implícito. Com base nesses métodos numéricos um código computacional foi implementado em linguagem Fortran. As simulações foram realizadas considerando transientes relacionados às variações na intensidade do fluxo de prótons proporcionado pelo acelerador de partículas atuando. No primeiro caso foi considerado um reator subcrítico homogêneo em geometria tridimensional para dois grupos de energia e um grupo de precursores de nêutrons atrasados. No segundo caso simulado foi considerado um reator subcrítico heterogêneo em geometria tridimensional para dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. Os resultados obtidos apresentaram uma razoável consistência com trabalhos anteriores que foram simulados em geometrias mais simples.

Palavras-chave: ADSR, Núcleo Subcrítico, Cinética Espacial, Acelerador de Partículas, Transientes.

ABSTRACT

The system driven by accelerator, Accelerator-Driven System (ADS), belongs to the new generation of advanced reactors under development that promise to drastically reduce the useful life of radioactive waste, for example, by the transmutation process. ADS-type subcritical reactor projects have attracted worldwide attention and are the subject of research and development in several countries. The objective of this work was to simulate transients associated with ADS in three-dimensional geometry. The neutron diffusion model was adopted, which led to the spatial kinetics equations. These equations were spatially discretized by the well-known finite difference numerical method and the temporal dependency was solved by the implicit Euler method. Based on these numerical methods, a computational code was implemented in Fortran language. The simulations were carried out considering transients related to the variations in the intensity of the proton flux provided by the particle accelerator acting. In the first case, a homogeneous subcritical reactor in three-dimensional geometry was considered for two energy groups and one group of delayed neutron precursors. In the second simulated case, a heterogeneous subcritical reactor in three-dimensional geometry was considered for two energy groups and six groups of delayed neutron precursors. The results obtained showed a reasonable consistency with previous works that were simulated in simpler geometries.

Keywords: ADSR, Subcritical Core, Spatial Kinetics, Particle Accelerator, Transients.

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ABI	Accelerator Beam Interruptions
ABO	Accelerator Beam Overpower
ADS	Accelerator Driven System
CW	Continuous Wave
FP	Fission Products
HLW	High Level Waste
IBA	Ion Beam Applications
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
JAEA	Japan Atomic Energy Agency
J-PARK	Japan Proton Accelerator Research Complex
KEK	High Energy Accelerator Research Organization
LBE	Chumbo com Bismuto
LLFP	Long-Lived Fission Products
LMW	Langenbuch, Maurer e Werner
LOCA	Loss of Coolant Accident
MA	Minor Actinides
MYRRHA	Multi-Purpose Hybrid Research Reactor for High-Tech Application
PWR	Pressurized Water Reactor
SCK-CEN	Belgian Nuclear Research Centre
SGRT	Steam Generator Tube Rupture
TRU	Transuranic

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	14
2. SISTEMA ADSR.....	17
2.1. COMBUSTÍVEL USADO EM REATORES CONVENCIONAIS.....	17
2.2. DESCRIÇÃO SISTEMA ADSR.....	19
2.2.1. Reator Subcrítico e Acelerador de Partículas.....	19
2.2.2. Materiais Estruturais.....	22
2.3. FÍSICA SISTEMA ADSR.....	23
2.3.1. Processo Spallation.....	23
2.3.2. Impacto da Transmutação e Incineração.....	24
2.4. SEGURANÇA SISTEMA ADSR.....	27
2.5. TRANSIENTES SISTEMA ADSR.....	28
2.6. PESQUISAS E DESENVOLVIMENTO SISTEMA ADSR.....	32
3. EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS EM TRÊS DIMENSÕES.....	34
4. DISCRETIZAÇÃO DA CINÉTICA ESPACIAL EM 3 DIMENSÕES.....	41
4.1. DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL.....	41
4.1.1. Sistema Matricial.....	45
4.2. DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL.....	49
5. RESULTADOS.....	52
5.1. VALIDAÇÃO DO MÉTODO NUMÉRICO.....	52
5.2. ANÁLISE DE TRANSIENTES EM ADS-3D.....	55
5.2.1. Caso 1 - Reator cubo homogêneo.....	56
5.2.1.1. Interrupção do Feixe do Acelerador (ABI).....	57
5.2.1.2. Sobre potência do feixe do acelerador (ABO).....	60
5.2.2. Caso 2 - Reator LMW modificado.....	62
5.2.2.1. Interrupção do feixe do acelerador (ABI).....	62
5.2.2.2. Sobre Potência do feixe do acelerador (ABO).....	67
6. CONCLUSÃO.....	70
7. REFERÊNCIAS	72

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema do sistema dirigido por acelerador.....	20
Figura 2 - Geometria do Reator ADS, vista superior e vista lateral.....	22
Figura 3 - Esquema da primeira etapa do processo do spallation.....	24
Figura 4 - Decaimento do calor total do combustível usado e as contribuições parciais dos produtos de fissão e dos actínídeos ao longo dos anos.....	25
Figura 5 - Radioatividade relativa do combustível usado ao longo do tempo.....	27
Figura 6 - Resposta total do transiente da reatividade e as contribuições separadas para o cenário de perda de fluxo par o CerCer.....	29
Figura 7 - Resposta do transiente de temperatura do combustível para o cenário de sobre potência do feixe para os três combustíveis.....	30
Figura 8 - Resposta do transiente de temperatura do combustível para o cenário de perda do refrigerante para os três combustíveis.....	31
Figura 9 - Representação de um nodo arbitrário n e sua vizinhança.....	42
Figura 10 - Esquema discretização temporal de [20].....	49
Figura 11 - Fluxo de nêutrons rápidos em $t=0s$	54
Figura 12 - Fluxo de nêutrons térmicos em $t=0s$	54
Figura 13 - Fluxo de nêutrons rápidos em $t=4s$	55
Figura 14 - Fluxo de nêutrons térmicos em $t=4s$	55
Figura 15 - Fluxo de nêutrons rápidos em $t=1s$	57
Figura 16 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos em $t=1s$	58
Figura 17 - ABI - Fluxo de nêutrons rápidos em $t=3s$	58
Figura 18 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos em $t=3s$	59
Figura 19 - ABI - Variação da potência relativa.....	59
Figura 20 - ABO - Fluxo de nêutrons rápidos, $t=3s$	60
Figura 21 - ABO - Fluxo de nêutrons térmicos, $t=3s$	61
Figura 22 - ABO - Variação da potência relativa.....	61
Figura 23 - Reator LMW modificado - Geometria radial.....	64
Figura 24 - Reator LMW modificado - Geometria axial.....	64
Figura 25 - ABI - Fluxo de nêutrons rápidos, $t=1s$	65
Figura 26 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos, $t=1s$	65
Figura 27 - ABI - Fluxo de nêutrons rápidos, $t=3s$	64

Figura 28 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos, $t=3s$	66
Figura 29 - ABI - Variação da potência relativa.....	67
Figura 30 - ABO - Fluxo de nêutrons rápidos, $t=3s$	68
Figura 31 - ABO - Fluxo de nêutrons térmicos, $t=3s$	68
Figura 32 - ABO - Variação da potência relativa.....	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Principais radionuclídeos do combustível usado.....	18
Tabela 2 - Probabilidade de transmutação dos transurânicos em reatores térmicos e em reatores rápidos.....	26
Tabela 3 - Reator cubo homogêneo - Parâmetros nucleares e cinéticos.....	53
Tabela 4 - Reator cubo homogêneo - Fluxo térmico normalizado.....	53
Tabela 5 - Reator LMW - Parâmetros nucleares e cinéticos de multigrupo.....	63

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO

A necessidade energética mundial pelo crescente consumo de eletricidade cada vez exige mais a expansão e diversificação da matriz energética, principalmente em países desenvolvidos e em desenvolvimento. Lamentavelmente a maioria dos países adotam políticas de expansão energética baseado em combustíveis fósseis, que incitados pelos baixos custos, acabam contribuindo substancialmente para o aumento do efeito estufa. Nesse contexto, as fontes de energia renováveis tem um papel fundamental na redução da emissão dos gases que contribuem para o aumento do efeito estufa. Ainda que apresentem um promissor potencial de crescimento, fontes de energia solar e eólica ainda estão longe de suprirem grandes demandas de carga de forma a garantir sozinhas confiabilidade e continuidade ao sistema elétrico. Atualmente, a energia da fissão nuclear, aparece então, como melhor alternativa viável de concorrer de forma competitiva (sem a necessidade de subsídios como a energia solar e eólica) com os combustíveis de origem fóssil sem a emissão de carbono, independentemente da disponibilidade de fonte hídrica.

Segundo o IPCC (Intergovernmental Panel on Climate Change), ou Painel Intergovernamental de Mudanças Climáticas, em seu quinto relatório [1], que alerta sobre as mudanças climáticas provocadas pelo aumento da temperatura global, resultado da queima de combustíveis fósseis principalmente para o transporte e para produção de energia elétrica. O relatório também diz que as taxas dos principais gases que contribuem para o efeito estufa nunca foram tão altas e propõe a redução da emissão desses gases como prioridade, o que pode ser alcançada com a substituição gradual da utilização dos combustíveis fósseis por fontes de energia renováveis proveniente de diferentes fontes.

Ainda que a energia nuclear seja a melhor opção para produção de energia limpa, sem poluir o meio ambiente, sua utilização ainda está associada com alguns impasses da sociedade relacionados com acidentes radiológicos e nucleares do passado. No entanto, cada vez que existe algum tipo de acidente, toda parte da segurança é revista, melhorias obrigatórias e novos protocolos de segurança são

implementados a fim de garantir que os mesmos problemas jamais aconteçam outra vez, tornando as usinas term nucleares cada vez mais seguras. Outro obstáculo da energia nuclear é a aceitação pela comunidade em relação ao destino final do combustível usado, devido aos riscos de proliferação de armas nucleares e também a dispendiosa forma de armazenamento seguro do combustível usado.

No entanto, a preocupação com relação ao combustível usado pode ser minimizada se ele for melhor aproveitado. O que é justamente a proposta do Reator Nuclear Subcrítico Dirigido por Acelerador, ou em inglês Accelerator Driven Subcritical Reactor (ADSR) [2], que é a combinação de um núcleo subcrítico com um acelerador de prótons. O feixe produzido pelo acelerador atinge o metal pesado localizado no centro do combustível, provocando o fenômeno do spallation e produzindo excesso de nêutrons, que podem ser utilizados para transmutar e incinerar a parte que exige maior atenção do combustível usado.

A proposta dessa dissertação é verificar o comportamento neutrônico do reator ADS simulando condições de mau funcionamento do acelerador de prótons e analisando o perfil da distribuição dos nêutrons para o transiente de interrupção do feixe de prótons e para o transiente de sobre potência do feixe de prótons, utilizando as equações da cinética espacial em três dimensões, deduzidas a partir da equação do transporte de Boltzmann com fonte externa de nêutrons. A equação final da difusão de nêutrons dependente do tempo com fonte externa obtida será discretizada espacialmente pelo método das diferenças finitas e a discretização temporal pelo método implícito de Euler enquanto a equação semidiscretizada dos precursores de nêutrons atrasados será integrada analiticamente no tempo. O sistema linear matricial final é então implementado no código que foi desenvolvido em Fortran pelo Instituto de Engenharia Nuclear (IEN), e os resultados das simulações são apresentados e analisados, dando continuidade ao estudo desenvolvida na dissertação “Análise Numérica de Transientes em um Reator Slab Guiado por Fonte Externa” [3] para uma dimensão e também na tese “Cinética Espacial para Modelar Transientes em reatores ADS” [4] em duas dimensões.

Após essa breve introdução, no capítulo 2 serão abordado conceitos básicos sobre o sistema ADSR, os materiais utilizados, a composição do combustível usado,

a descrição do processo Spallation, o impacto da transmutação e uma análise sobre os transientes mais comuns do reator ADS, além de uma rápida perspectiva sobre projetos internacionais.

No capítulo 3, as equações da cinética espacial da difusão de nêutrons em três dimensões será deduzida a partir da equação de transporte de Boltzmann. O termo da contribuição da fonte externa de nêutrons será incluída e a equação completa apresentada.

No capítulo 4, as equações obtidas do capítulo 3 serão discretizadas no espaço e no tempo. Na discretização espacial será utilizado o método das diferenças finitas de malha fina com esquema centrado na interface e a equação semidiscretizada apresentada. A discretização temporal da equação obtida é feita diretamente para as equações dos precursores e pelo método implícito de Euler para a equação de difusão de nêutrons semidiscretizada. A equação final será apresentada na forma de um sistema linear matricial.

No capítulo 5, os resultados das simulações são apresentados em três partes. A primeira simulação é para validar o código computacional desenvolvido, utilizando um exemplo de um reator da literatura, simulando o mesmo transiente e comparando os resultados. A segunda simulação utiliza o modelo de um reator homogêneo cúbico com fonte externa e terceira utiliza um modelo de um reator PWR simplificado com fonte externa, para esses casos serão simulados os transientes de interrupção do feixe e de sobre potência.

Finalmente as conclusões deste trabalho serão apresentadas no capítulo 6 com a análise gráfica dos resultados, com sugestões e recomendações para estudos futuros.

CAPÍTULO 2 - SISTEMA ADSR

2.1 COMBUSTÍVEL USADO EM REATORES CONVENCIONAIS

Na maior parte dos reatores nucleares convencionais, as pastilhas de combustível novo são constituídas de dois isótopos do Urânio. A maior parte é do isótopo U-238 que tem alta seção de choque de captura de nêutrons e acaba gerando a maior parte dos transurânicos (TRU), incluindo os actinídeos menores (MA). Os transurânicos são os átomos de Urânio que não sofreram fissão ao capturar um nêutron, tornando-se mais pesados. O restante da pastilha combustível é preenchido com um enriquecimento máximo de até 10% do isótopo de U-235, que tem grande seção de choque de fissão e acaba gerando a maior parte dos produtos de fissão (FP).

De acordo com [5], 96,5% do combustível usado é composto de Urânio e Plutônio, que podem ser reciclados e reutilizados, diminuindo a necessidade de extração de minério. Inclusive, o plutônio, com apenas 0,9% da composição total do combustível usado, pode ser usado para enriquecimento do combustível novo, alternativamente ao U-235. Ou seja, apenas 3,5% do combustível usado eram considerados rejeito, necessitando de cuidados especiais por um extenso período. Entretanto desses 3,5%, 2,9% são produtos de fissão estáveis e somente 0,6% são realmente preocupantes, devido a sua alta radioatividade e longa meia-vida, são os actinídeos menores (MA) e os produtos de fissão de longa vida (LLFP). No entanto, os MA e LLFP são fissionáveis na maioria dos casos e podem ser utilizados como combustível em reatores especiais do tipo ADS.

Na Tabela 1 abaixo, adaptada de [6], vemos os principais radionuclídeos gerados em 20 mil toneladas de combustível usado e a respectiva meia-vida (em anos), massa (em tonelada) e atividade (em Becquerel) de cada isótopo. A Tabela 1 foi dividida entre os isótopos do Urânio e os transurânicos (TRU) em (a), que decaem principalmente por radiação alfa, e os produtos da fissão (FP) em (b), que decaem por radiação gama.

Tabela 1 - Principais radionuclídeos do combustível usado, em (a) os actinídeos e em (b) os produtos de fissão, adaptado de [6].

ISÓTOPO	MEIA-VIDA (anos)	MASSA (tonelada)	ATIVIDADE (Bq)	ISÓTOPO	MEIA-VIDA (anos)	MASSA (tonelada)	ATIVIDADE (Bq)
U-235	704.000.000	205,6	1,63E+13	Se-79	65.000	0,1	2,6E+14
U-236	23.400.000	81,8	1,95E+14	Sr-90	29	9,6	4,9E+19
U-238	4.470.000.000	18807	2,30E+14	Zr-93	1.530.000	14,4	1,33E+15
Pu-238	88	3	1,94E+18	Tc-99	213.000	16,4	1,03E+16
Pu-239	24.100	114,6	2,60E+17	Sn-126	100.000	0,4	4,3E+14
Pu-240	6.540	44,2	3,70E+17	I-129	15.700.000	3,6	2,4E+13
Pu-241	14	23,6	9,20E+19	Cs-135	2.300.000	7,2	3E+14
Pu-242	376.000	9,8	1,41E+15	Cs-137	30	32,4	1,04E+20
Np-237	2.140.000	8,2	2,10E+14				
Am-241	442	4,1	8,20E+17				
Am-243	7.380	2	1,51E+16				
Cm-244	18	0,46	1,39E+18				
Cm-245	8.530	0,056	3,50E+14				

(a)

(b)

Na Tabela 1 (a) podemos destacar que todos os isótopos do Urânio e do Plutônio podem ser reprocessados com alta eficiência e controle. Principalmente o controle, por causa do isótopo Pu-239 que é o melhor substrato utilizado como combustível para armas e que pode ser facilmente incinerado por um ADSR. Os actinídeos menores (Netúnio, Amerício e Cúrio) que são assim chamados, pois são os actinídeos que estão em menores quantidades no combustível usado, apresentam radioatividade muito alta e meia-vida longa, exigindo um repositório geológico de longo prazo até que toda a radioatividade se torne inócua, ou que sejam transmutados e incinerados em um reator ADS tornando-os nuclídeos de curta vida ou até estáveis. Já na Tabela 1 (b) podemos destacar que o Sr-90 e o Cs-137, produtos de fissão de meia-vida média, não tem grande utilidade, por que apresentam baixa probabilidade de transmutação e devem ir direto para reservatório supervisionado. Enquanto que os produtos de fissão de meia-vida longos altamente radioativos como o Tc-99 e o I-129, que devem também ir para um repositório, também podem ser transmutados em nuclídeos menores e estáveis por um reator ADS.

Em outras palavras, o reator subcrítico dirigido por um acelerador de prótons de alta energia tem grande potencial em transmutar e incinerar a parte que merece maior atenção do combustível usado. Isso proporciona uma economia grande, pois além do Reator ADS ser capaz de produzir energia dos MA, antes considerados

rejeito, os incinera em núclídeos menores de meia-vida curta e até estáveis, reduzindo o espaço e o tempo necessário no repositório que pode ser mais simples e mais barato, no entanto, ainda necessário. Assim sendo, para o uso do Reator Subcrítico é de extrema importância que o combustível usado, em um primeiro estágio, passe por um processo otimizado de reprocessamento, para separar o Urânio e Plutônio (para serem reciclados) dos produtos de fissão junto dos actinídeos menores. E claro, em um segundo estágio um eficiente processo de particionamento, para separar os actinídeos menores dos produtos de fissão de meia-vida média e também dos produtos de fissão de meia-vida longa.

2.2 DESCRIÇÃO DO SISTEMA ADSR

2.2.1 Reator Subcrítico e Acelerador de Partículas

Conforme pode ser visto na Figura 1 abaixo, um sistema dirigido por acelerador de prótons é muito parecido com um sistema convencional, exceto claro, pelo acelerador de prótons e pelo estado permanente de subcriticalidade do núcleo. Também pode ser observado que parte da energia produzida pelo reator subcrítico é necessária para manter o acelerador operando, retroalimentando o sistema. Portanto, o sistema ADS é basicamente composto por dois subsistemas, o subsistema do acelerador de prótons e do núcleo subcrítico que contém o combustível estrategicamente distribuído concentricamente ao alvo no centro, que ao ser atingido pelo feixe de prótons produz o fenômeno do spallation.

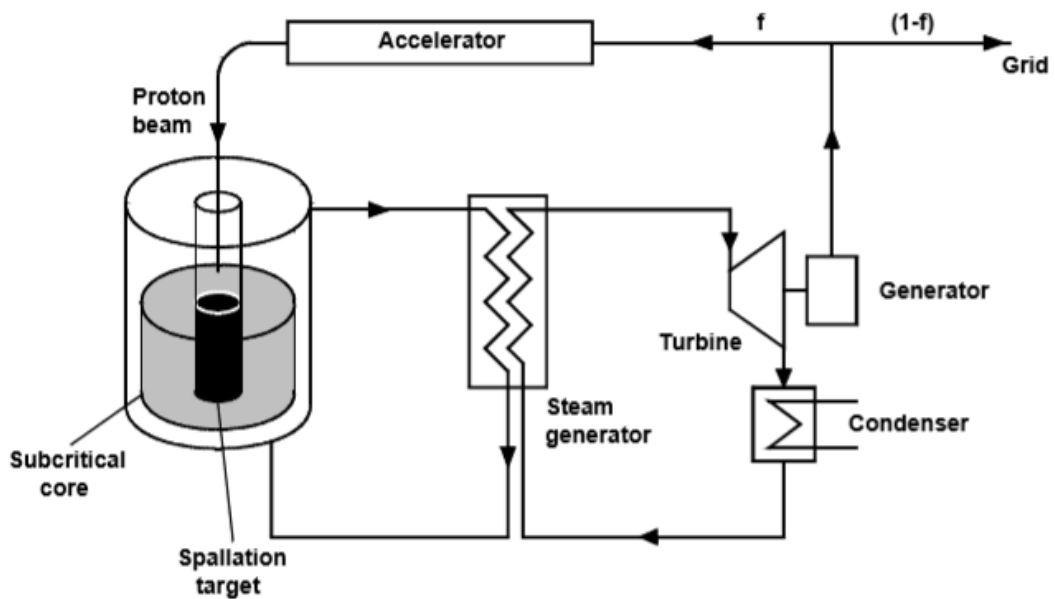


Figura 1 - Esquema do sistema dirigido por acelerador de [7].

O reator subcrítico é um reator projetado para ter fator de multiplicação sempre menor do que um, ou seja, a produção de nêutrons é menor do que a perda de nêutrons a cada geração e não é viável sustentar uma reação em cadeia com potência estacionária. A criticalidade só é então alcançada com uma fonte externa de nêutrons, e de acordo com [8], diferentemente dos reatores convencionais que tem o comportamento cinético dos nêutrons no reator controlado pelos nêutrons atrasados, o reator subcrítico tem seu comportamento cinético definido por uma constante de tempo diretamente ligada com a potência da fonte externa de nêutrons. Deste modo, a resposta do reator subcrítico e o fator de multiplicação total do sistema estão diretamente relacionados com o comportamento de acelerador. E por isso, a grande importância no estudo dos transientes causados por comportamentos anormais do acelerador.

O acelerador pode ser dividido a partir do modo que acelera as partículas, entre aceleração linear (Linac Accelerator) e cíclica, a aceleração cíclica pode ainda ser ao longo de um caminho em espiral (Cyclotron Accelerator), que acelera a partícula a partir do centro, ou em um formato diferente (Synchrotron Accelerator), que precisa de outro tipo de acelerador como ignitor, já que este não acelera partículas paradas. Como o poder de penetração do próton no alvo está diretamente relacionado com a energia do feixe [8], e apesar do acelerador em espiral fornecer

um feixe de prótons contínuo (diferente do acelerador linear com pulsos), ideal para o sistema ADS segundo [7], ele não alcança potências tão altas quanto o acelerador linear, por isso, o acelerador linear é o mais utilizado, apesar de ter um custo elevado, devido à longa extensão que o acelerador linear precisa para alcançar potências maiores, pois tem a necessidade de proteção contra a radiação ao longo de todo percurso.

Sem dúvidas a parte mais importante do reator ADS é o acelerador de prótons, sem ele não é possível manter o sistema crítico, em condições normais de operação. Isso representa um avanço na segurança, pois se o feixe de prótons é cessado, o reator volta para a condição natural de subcriticalidade com k_{eff} menor do que 1, o que retrata uma condição de desligamento obrigatória. Com certeza, o reator subcrítico é uma segurança intrínseca, que juntamente com um acelerador de partículas pode ser utilizado para compensar qualquer variação de reatividade. O alvo do acelerador de prótons, que é um metal pesado e graças ao processo do Spallation, libera várias partículas ao ser atingido, principalmente nêutrons, esse excesso de nêutrons que mantém o reator projetado para ser subcrítico em criticalidade virtual. Essa criticalidade, garantida pela fonte externa, permite a transmutação dos LLFP e incineração dos MA, que juntamente com o reprocessamento total do Urânio e do Plutônio, reduz a radioatividade do combustível usado para níveis seguros. Desta forma, reduz o problema do armazenamento do combustível usado de milhares de anos para algumas centenas de anos.

Essa interação entre acelerador e reator subcrítico também possibilita outras vantagens além da transmutação e da incineração dos actínídeos, a abundante produção de nêutrons causada pelo bombardeamento de prótons no alvo cria uma excelente condição para sintetizar núcleos férteis, o que possibilita a utilização de outras fontes de combustível como o Tório, muito mais abundante no planeta do que o Urânio. Além do que, essa simbiose permite o estudo de outros materiais já que o sistema ADS é compatível com diferentes configurações de diferentes matérias e combustíveis e projetado para suportar altas radioatividades.

2.2.2 Materiais Estruturais

A Figura 2 mostra o reator subcrítico em dois cortes, em (a) a vista superior do núcleo do Reator ADS, onde podemos ver o alvo no centro, cercado pelo combustível que pode ser todo homogêneo como está representado ou ainda com diferentes camadas de combustível. Posicionando o combustível reprocessado com combustível novo estrategicamente, de forma a potencializar a transmutação dos produtos de fissão e a incineração dos actínídeos. Já na Figura 2 (b) na vista lateral, onde é possível ver em detalhes os principais componentes do reator subcrítico, como o canal do feixe de prótons (Beam Channel) que conduz o feixe no vácuo, a janela do feixe (Beam Window) que é a interface entre o acelerador e o reator e a região do alvo (Target).

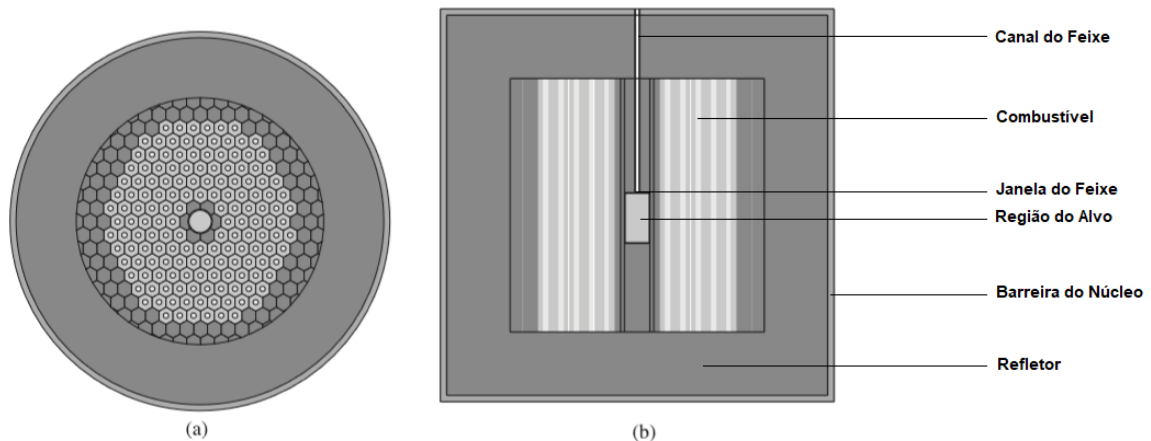


Figura 2 - Geometria do Reator ADS, em (a) vista superior e em (b) vista lateral, adaptado de [6].

O alvo e a janela do feixe são os componentes que merecem maior atenção dentre todos os materiais estruturais do sistema ADS, necessitam de maior manutenção preventiva e troca de peças devido aos danos causados pelo alto nível de radiação provocado pelos prótons e nêutrons [8].

De acordo com [8 e 9] o alvo deve ser um metal pesado como Chumbo, Tungstênio, Tântalo, Chumbo com Bismuto (LBE), Mercúrio e até Urânio empobrecido e que apesar do alvo estar geralmente no estado líquido ou sólido, para grandes densidades de potência o metal pesado deve estar no estado líquido, pois o alvo deve ter boa capacidade de se resfriar e remover o calor para o

refrigerante. Ainda segundo [8] e também [7], para diminuir avarias provocadas por corrosão e erosão em todos os materiais do núcleo que estão em contato direto com o metal líquido, o alvo e o refrigerante devem ser ambos do mesmo material, normalmente o Chumbo ou o LBE, e estarem na forma líquida.

2.3 FÍSICA DO SISTEMA ADSR

2.3.1 Processo de Spallation

Distintamente dos processos de fissão e da fusão, o processo do spallation é um sistema endotérmico que precisa de partículas energizadas para ocorrer, e conforme [10] é o processo mais eficiente dos mencionados, para partículas de alta velocidade. No caso do reator ADS, o próton é acelerado perto da velocidade da luz que colidi com o núcleo do metal pesado, o próton penetra no núcleo do metal provocando processos internos em cascata que liberam prótons, píons e nêutrons de alta energia, em seguida ocorre a desexcitação do núcleo e a liberação de diversas partículas, como prótons, nêutrons, partículas alfa entre outros, porém desta vez com energia menor, essa fatura de nêutron proporcionado pelo fenômeno do spallation pode ser suficiente para suprir a escassez de nêutrons do reator subcrítico.

O processo completo do spallation consiste em dois estágios, sendo o primeiro dividido em duas etapas e o segundo em uma etapa, conforme [11]. Após o próton de alta energia atingir o núcleo do alvo, o núcleo entra em cascata intranuclear, em que algumas partículas via sucessivas colisões internas, depositam sua energia cinética no núcleo deixando-o cada vez mais excitado, enquanto que outras partículas altamente energizadas podem sair do núcleo e induzir mais processos de spallation em núcleos diferentes, é a cascata internuclear ou cascata hadrônica que pode ser vista na Figura 3. Até o ponto em que ocorre a desexcitação do núcleo, chamada de evaporação, que é o estágio final do processo spallation, quando o núcleo relaxa emitindo partículas, principalmente nêutrons com baixa energia.

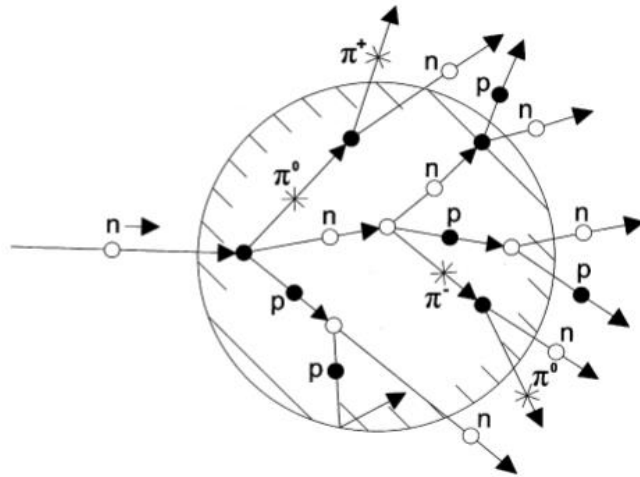


Figura 3 - Esquema da primeira etapa do processo do spallation [12].

De acordo com [8-9], alguns motivos afetam diretamente a distribuição dos nêutrons no núcleo subcrítico, como o tipo do material do alvo, como a variação da geometria do alvo e como a energia incidente do próton, esses são os principais motivos que afetam o comportamento neutrônico.

2.3.2 Impacto da Transmutação e Incineração

A Figura 4 adiante mostra o calor de decaimento natural total ao longo dos anos do combustível usado e também as contribuições separadas dos produtos de fissão e dos actínidos. Analisando o gráfico podemos perceber que a contribuição dos produtos de fissão na radioatividade total não são tão preocupantes, pois tem um decaimento relativamente rápido no início e em pouco tempo alcançam níveis naturais de radioatividade. No entanto, ao contrário dos produtos de fissão, os actínidos tem um decaimento muito mais lento, esses são realmente preocupantes por que serão nuclídeos muito radioativos por um período muito extenso, merecendo atenção especial por todo esse tempo, e de acordo com [13], o problema do armazenamento e o custo do ciclo do combustível podem ser minimizados significativamente se os actínidos forem reduzidos ou destruídos.

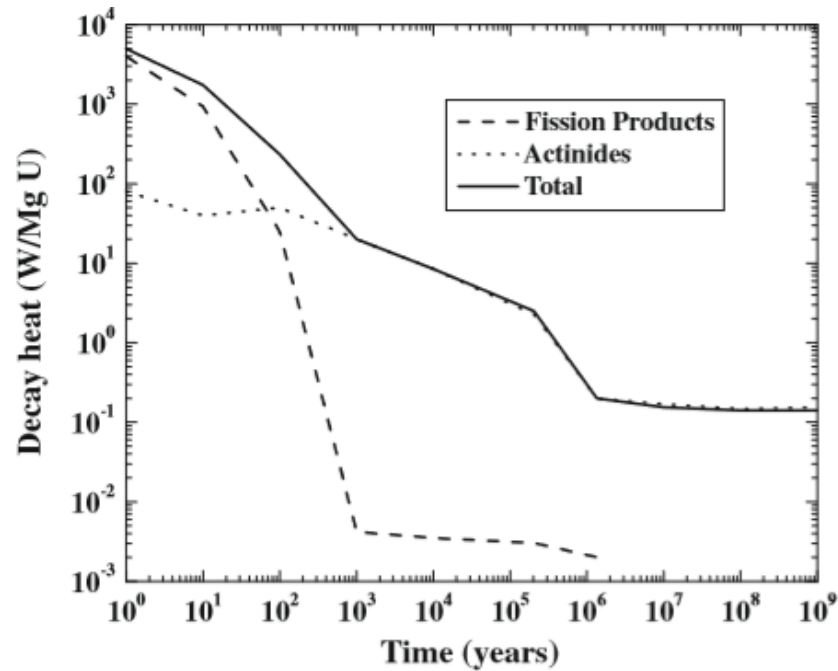


Figura 4 - Calor de decaimento total do combustível usado e as contribuições parciais dos produtos de fissão e dos actinídeos ao longo dos anos de [13].

Com um reator ADS é possível transmutar os MA e alguns FP em núclídeos menores e menos tóxicos, e graças à abundância de nêutrons proporcionado pelo feixe de prótons pode-se reduzir o tamanho do repositório e o tempo de observação necessário. Segundo [8], um isótopo só é vantajoso como combustível em um reator ADS caso tenha o tempo de transmutação muito menor do que o seu tempo natural de meia-vida, assim sendo, os produtos de fissão de meia-vida curta e média, que tem baixa probabilidade de transmutação, não são interessantes para serem transmutados, entretanto os produtos de fissão de longa vida (LLFP) podem absorver nêutrons e após alguns decaimentos se tornarem núclídeos menos radioativos de curta meia-vida e rapidamente estáveis, apesar de não terem uma grande participação na diminuição da radioatividade total, diminuem sensitivamente o volume total.

Distintamente dos FP, os MA podem ser transmutados e incinerados ao absorver nêutrons e sofrer fissão, gerando energia e nêutrons enquanto são reduzidos a núclídeos estáveis menores ou de curta vida. Esse poder de incineração do reator ADS também pode ser usado para diminuir o risco de proliferação de armas nucleares, já que pode incinerar totalmente os isótopos do Plutônio. Ademais,

a fatura de nêutrons do fenômeno do spallation também possibilita a sintetização de núcleos férteis em núcleos físséis como o caso do ciclo do Tório-Urânio, que produz menos MA e FP menos perigosos do que o ciclo do Urânio-Plutônio.

Além do mais, conforme [13-14] e com a análise da Tabela 2, a probabilidade de um actínídeo ser transmutado ao absorver um nêutron causando fissão é sempre maior, e em alguns casos muito maior em reatores rápidos do que em reatores térmicos, que necessitam de maior moderação, pois os MA apresentam seção de choque de captura de nêutrons maior no espectro de altas energias. Em contrapartida, os produtos de fissão apresentam melhor probabilidade de transmutação em reatores com nêutrons térmicos, conforme [7].

Tabela 2 - Probabilidade de transmutação dos transurânicos em reatores térmicos e em reatores rápidos, adaptado de [14].

ISÓTOPO	REATOR TÉRMICO	REATOR RÁPIDO
Np-237	3%	27%
Pu-238	7%	70%
Pu-239	63%	85%
Pu-240	1%	55%
Pu-241	75%	87%
Pu-242	1%	53%
Am-241	1%	21%
Am-242	75%	94%
Am-243	1%	23%
Cm-242	1%	10%
Cm-243	78%	94%
Cm-244	4%	33%

Sem a transmutação o combustível usado ainda é um problema, mesmo com um reprocessamento efetivo de todo o Urânio e do Plutônio, ele ainda necessita de resfriamento e do repositório por um prolongado tempo. Um processo eficiente de particionamento dos FP e dos MA permite que os resíduos de alto nível (HLW - High Level Waste) do reprocessamento possam ser reutilizados pelo Reator ADS para gerar energia e diminuir o tempo de armazenamento do combustível usado de longo prazo para médio prazo.

O principal impacto da transmutação pode ser visto na Figura 5, a transmutação dos MA e dos LLFP aliado a um eficaz reprocessamento dos isótopos do Urânio e do Plutônio, reduz o tempo de decaimento natural do rejeito para os

níveis naturais do minério de Urânio de vários milênios para algumas centenas de anos. A diminuição drástica da radioatividade não é a única consequência positiva da utilização do Reator ADS para transmutar os MA e os LLFP, o volume total do rejeito também é reduzido, e conseqüentemente, o tempo na piscina de resfriamento e o tempo no repositório geológico supervisionado também, o que reduz os custos totais do armazenamento seguro.

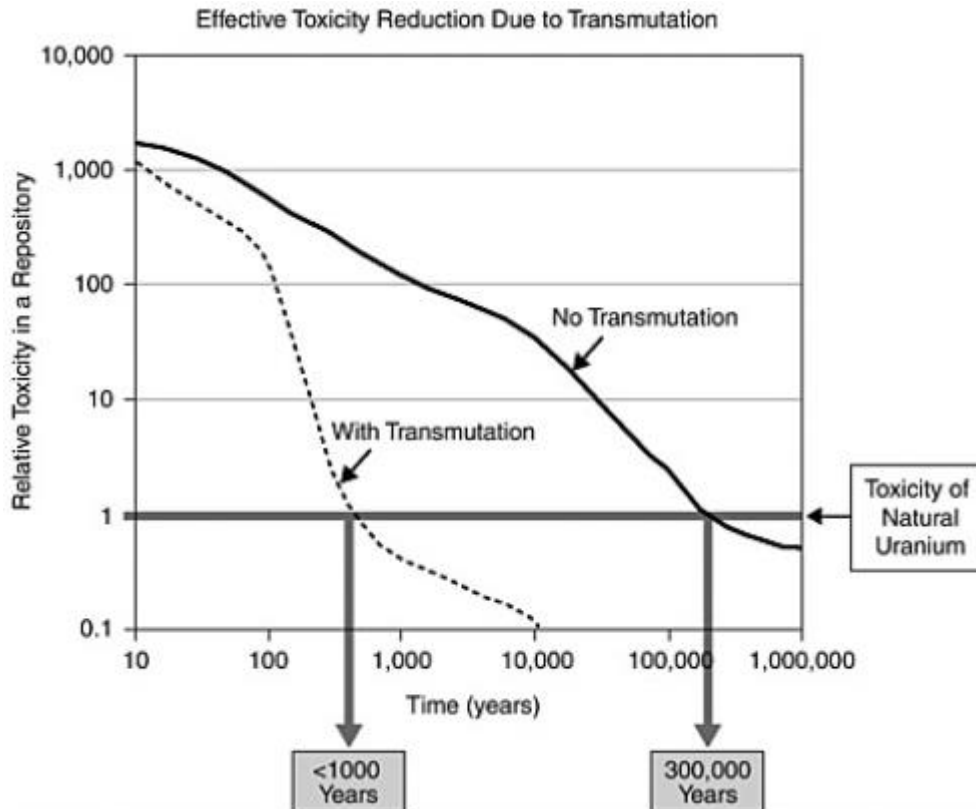


Figura 5 - Radioatividade relativa do combustível usado ao longo do tempo de [15].

2.4 SEGURANÇA DO SISTEMA ADSR

Em 2030 a maioria das usinas term nucleares do planeta serão descomissionadas e substituídas pelos reatores de quarta geração que devem cumprir exigências rígidas de produção de energia de forma economicamente competitiva, sustentável, com uso eficiente do combustível, segurança e resistência a riscos de proliferação [16]. O núcleo subcrítico do sistema ADS garante sozinho uma segurança intrínseca ao sistema, com sua condição inerente de desligamento, e o acelerador de prótons garante um controle adicional do comportamento neutrônico dentro do núcleo do reator ADS. Juntos, núcleo subcrítico e acelerador,

alcançam a criticalidade virtual graças ao processo do Spallation, que possibilita produzir energia elétrica suficiente para auto sustentar o sistema e o excedente de energia pode ser entregue para a rede elétrica. O excesso de nêutrons proporcionado pelo processo do Spallation possibilita a transmutação dos isotopos que merecem maior atenção do combustível usado, reduzindo os níveis de atividade para níveis seguros e reduzindo o tempo de de meia-vida de séculos para algumas centenas de anos, além de contribuir com a resistência ao risco de proliferação, já que o reator dirigido por acelerador pode incinerar com eficiência os isotopos mais visados do combustível usado para armas nucleares.

De forma a garantir a segurança total do sistema ADS e de extinguir qualquer possibilidade de erro ou acidente, devem ser estimulados o uso de simulações computacionais para estudar as respostas do Reator ADS e do acelerador de prótons para diversas situações de estresse, como os transientes no fluxo de nêutrons relacionados com o comportamento do acelerador de partículas, as simulações tem também importância para termos dados suficientemente sólidos para implementação desse tipo de reator cumprindo com o seu propósito com segurança.

2.5 TRANSIENTES DO SISTEMA ADSR

Três tipos diferentes de combustíveis e três condições diferentes de estresses são impostas ao reator ADS estudado, e então são analisados as respostas da reatividade, temperatura e potência [17]. Dos combustíveis utilizados, dois são compostos por Óxidos, são o CerCer, uma mistura formada de cerâmica com cerâmica a base de magnésia, e o CerMet, que é uma mistura de cerâmica com metal a base de molibdênio, e o terceiro é um composto a base de nitreto de zircônio, o Nitride. Primeiro é analisado o transiente para um cenário de perda de fluxo, onde em [17] foi considerado que todas as bombas primárias para o resfriamento do núcleo foram acionadas e que o acelerador continua ligado, porém com potência menor, simulando um desligamento mal sucedido. O segundo transiente analisado é a sobre potência do feixe, que segundo [17] pode ocorrer por uma falha no sistema de controle, por mau funcionamento do acelerador e até por erro operacional. Por fim é analisado o transiente para perda do refrigerante, com

ruptura do gerador de vapor (SGRT - Steam Generator Tube Rupture) após 1 segundo de análise e com o desligamento do feixe após 2 segundos.

O Figura 6 mostra o transiente da reatividade para perda do fluxo no reator ADS e as contribuições individuais somente para o combustível do tipo CerCer. E o combustível CerCer teve uma resposta para a reatividade total negativa, pois a maior contribuição é devido à expansão radial do núcleo e da expansão axial do combustível que são negativas, apesar da grande contribuição positiva da reatividade por causa da expansão do refrigerante. Assim, de acordo com [17], o aumento da temperatura do refrigerante é a maior preocupação desse cenário por que pode provocar o derretimento do revestimento do combustível.

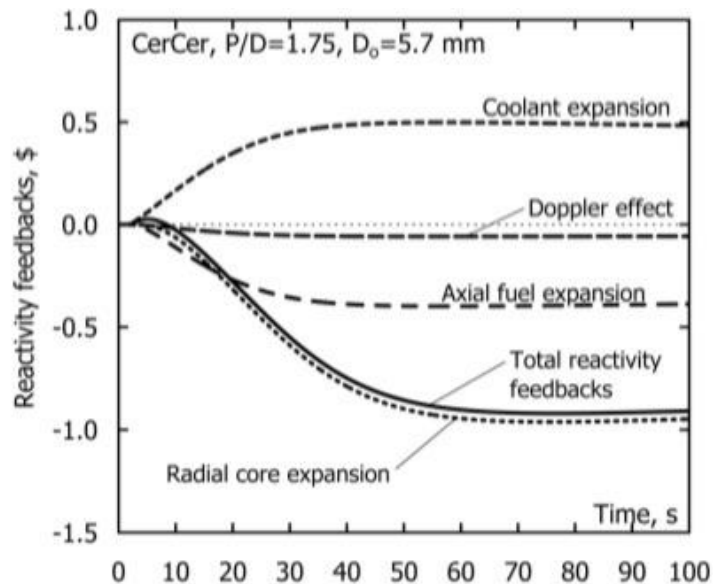


Figura 6 - Resposta total do transiente da reatividade e as contribuições separadas para o cenário de perda de fluxo para o combustível CerCer [17].

A Figura 7 mostra o transiente de temperatura dos três tipos de combustível para uma sobre potência do feixe de prótons, que responde de imediato com o aumentando da temperatura do combustível, e de acordo com [17] corre risco de derretimento do combustível.

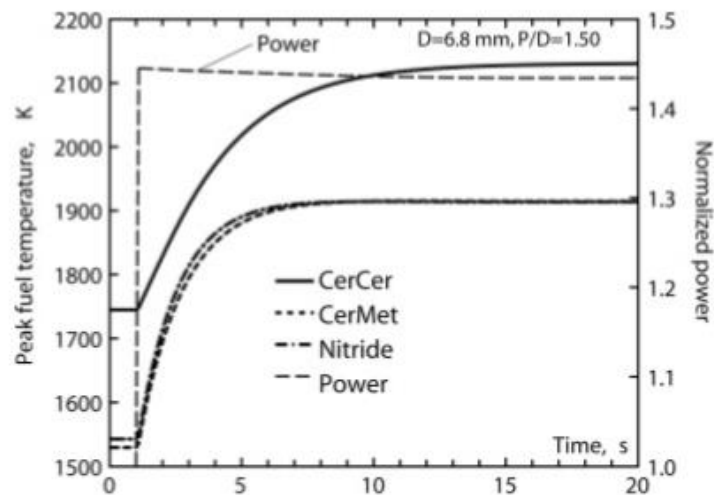


Figura 7 - Resposta do transiente de temperatura do combustível para o cenário de sobre potência do feixe para os três combustíveis [17].

A Figura 8 mostra o transiente de temperatura para perda de refrigerante ocasionada pelo SGRT para os três tipos de combustível, onde o acidente ocorre após 1 segundo e o desligamento do acelerador 2 segundos após o início da análise. Em um acidente de perda de refrigerante provocado por SGRT, o aumento da temperatura é muito rápido e pode comprometer o combustível ocasionando em derretimento do mesmo [17], e que o calor gerado após o desligamento do acelerador é devido a fissão dos nêutrons atrasados e do decaimento do calor, [17] afirma então que o simples desligamento do acelerador não é suficientemente para garantir que não ocorra um LOCA (Loss of Coolant Accident).

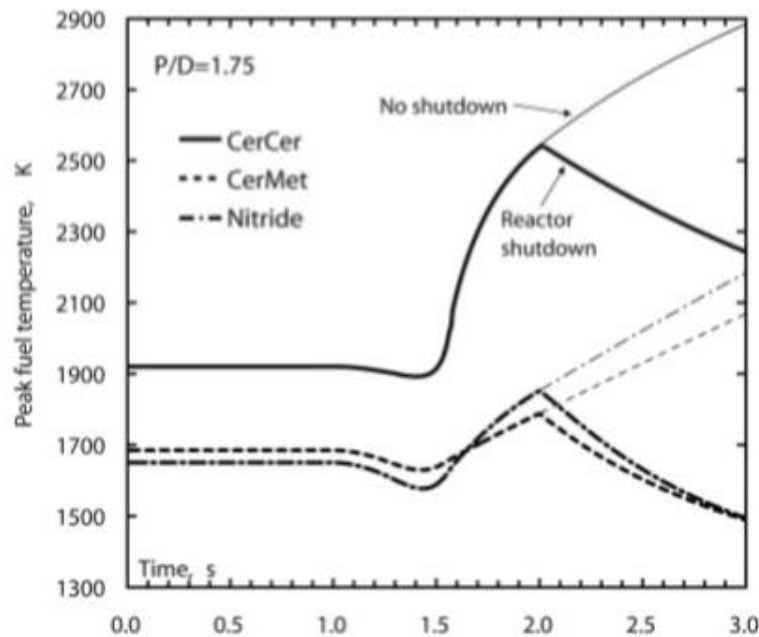


Figura 8 - Resposta do transiente de temperatura do combustível para o cenário de perda do refrigerante para os três combustíveis [17].

Algumas questões relativas com a fonte externa ainda precisam ser investigadas, como a relação entre a dinâmica dos transientes e a reatividade no reator subcrítico, e que é essencial a supervisão do feixe produzido pelo acelerador para garantir a segurança de todo o sistema, pois o funcionamento incorreto do acelerador pode causar estresse em excesso nos materiais estruturais, reduzindo seu tempo de vida útil e aumentando a necessidade da troca de peças [8].

Dada à importância do subsistema do acelerador de partículas junto com a dependência do sistema ADS diretamente relacionado com o funcionamento do acelerador, justificasse o interesse no foco ao estudo dos transientes relacionados com comportamento anômalo da intensidade do feixe do acelerador e as suas consequências. Serão estudadas nesse trabalho duas condições de risco relacionados com o feixe, utilizando as equações da cinética espacial de difusão de nêutrons incluindo a fonte externa, em três dimensões, para descrever a resposta da distribuição do fluxo de nêutrons dentro de reator subcrítico de forma mais realística possível, para picos no feixe de prótons e também para interrupções no feixe.

Um pico na potência do feixe, ou em outras palavras a sobre potência do feixe do acelerador (ABO - Accelerator Beam Overpower) e interrupções no feixe (ABI -

Accelerator Beam Interrupt) podem produzir calor em excesso e danificar componentes importantes como a janela do feixe, ocasionando cenários de acidente. A simulação desses transientes característicos do ADSR em linguagem Fortran e as respostas do sistema serão discutidas e analisadas nessa dissertação com o intuito de aumentar confiabilidade e garantir a segurança total do sistema ADS.

2.6 PESQUISAS E DESENVOLVIMENTO DO SISTEMA ADSR

Vários países investem individualmente em pesquisas e desenvolvimento, para o aprimoramento e consolidação dos seus sistemas ADS e seus subsistemas, principalmente países Europeus, EUA e Japão. Apesar disso, também existem alguns grandes projetos em conjunto com várias organizações de diferentes países, como é o caso do Complexo de Pesquisa em Acelerador de Prótons Japonês (J-PARK - Japan Proton Accelerator Research Complex) localizado na aldeia de Tokai no Japão e o Reator Híbrido Multipropósito para Aplicações de Alta Tecnologia (MYRRHA - Multi-Purpose Hybrid Research Reactor for High-Tech Application) localizado em Mol na Bélgica.

J-PARK é um projeto em conjunto da Organização de Pesquisa com Aceleradores de Alta Energia (KEK - High Energy Accelerator Research Organization) e com a Agência de Energia Atômica do Japão (JAEA - Japan Atomic Energy Agency). O empreendimento contempla três aceleradores de prótons, um acelerador linear de 400 MeV e dois aceleradores cíclicos do tipo sincrotron de 3 e de 50 GeV com instalações específicas para o estudo de matérias estruturais, realização de experimentos nucleares e de física da partículas e também estudos sobre transmutação [18].

MYRRHA é um programa em parceria com o Centro de Pesquisa Nuclear da Bélgica (SCK-CEN - Belgian Nuclear Research Centre), a Aplicações com Feixe de Íon (IBA - Ion Beam Applications) e juntamente com diversos países, como EUA, Israel e países Europeus, como a Alemanha, a França e a Rússia entre outros. Inicialmente era um projeto pequeno de produção de radioisótopo, hoje contempla estudos sobre o desenvolvimento de materiais estruturais, desenvolvimento de combustíveis, produção de radioisótopos para a medicina, aplicações na indústria e

transmutação dos HLW, segundo [19], o núcleo subcrítico do MYRRHA é flexível, pois suporta trabalhar tanto no espectro dos nêutrons rápidos quanto no espectro dos nêutrons térmicos mostrando versatilidade e proficiência.

CAPÍTULO 3 - EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS EM TRÊS DIMENSÕES

A maioria dos estudos e trabalhos sobre Reatores ADS utiliza a cinética pontual para interpretação dos dados devido sua simplicidade, uma vez que ela só trata de três variáveis independentes no espaço e não considera o tempo, satisfatório para estudos preliminares. No entanto, para estudos mais realísticos, como por exemplo, os transientes do Reator ADS, se faz necessário o uso da cinética espacial, com sete variáveis independentes. Nesse capítulo a equação da cinética espacial de difusão de nêutrons em três dimensões dependente do tempo será deduzida a partir da equação de Boltzmann, emprestado da teoria cinética dos gases para descrever o deslocamento dos nêutrons.

A solução das equações da cinética espacial de difusão de nêutrons, trás como resposta o fluxo de nêutrons, fundamental para calcular a taxa de reação da fissão, a densidade de potência no reator, a potencia do reator, a reatividade no núcleo, entre outras importantes taxas de reações nucleares. A resolução dessas equações é fundamental para a determinação de vários parâmetros importantes para o controle, para tomadas de decisões e para o monitoramento do reator nuclear na partida, no desligamento e também em operação normal. Inclusive, segundo [20], o monitoramento do Reator ADS durante condição de operação normal, com potencia estacionária é fundamental, diferentemente dos reatores convencionais que merecem maior atenção somente durante a partida e no desligamento. O tratamento em três dimensões trás um modelo mais preciso e realista do comportamento neutrônico dentro do reator nuclear, essencial para estudar possíveis cenários de acidentes, seus transientes e atestar a segurança do Reator ADS.

A equação de Boltzmann utilizada para descreve o transporte de nêutrons no reator é uma equação de equilíbrio entre as taxas de perdas e as taxas de produção de nêutrons em uma unidade de volume em cada instante. Desse modo, a equação de transporte de nêutrons, retrata a contagem total dos nêutrons em uma unidade de volume que depende também do tempo, da energia dos nêutrons e da direção

angular dos nêutrons, representado por $\hat{\Omega}$, que é um vetor unitário na direção do vetor velocidade do nêutron. Assim sendo, de acordo com [21], a equação de transporte de Boltzmann dependente do tempo para o fluxo angular é completamente descrita em:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) &= -\hat{\Omega} \cdot \nabla \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) + Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \\ Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) &= \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, E' \rightarrow E, t) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) + \\ &+ (1 - \beta) \frac{\chi_0(E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \frac{\chi_l(E)}{4\pi} c_l(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(\vec{r}, t) = -\lambda_l c_l(\vec{r}, t) + \beta_l \int_0^\infty dE v \Sigma_f(\vec{r}, E, t) \int_{4\pi} d\hat{\Omega} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \quad \text{com } l = 1, \dots, L \quad (3.2)$$

Onde,

L = Número total de grupos de precursores de nêutrons atrasados;

$\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$ = Fluxo angular de nêutrons na posição \vec{r} , na direção $\hat{\Omega}$, na energia E e no tempo t;

$v(E)$ = Velocidade do nêutron na energia E;

ν = Número médio de nêutrons emitidos por fissão;

$\Sigma_t(\vec{r}, E, t)$ = Seção de choque macroscópica total, na posição \vec{r} , na energia E e no tempo t;

$\Sigma_f(\vec{r}, E, t)$ = Seção de choque macroscópica de fissão na posição \vec{r} , na energia E e no tempo t;

$\Sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, E' \rightarrow E, t)$ = Seção de choque macroscópica de espalhamento na posição \vec{r} , da direção $\hat{\Omega}'$ para a direção $\hat{\Omega}$, da energia E' para a energia E e no tempo t;

$\chi_0(E)$ = Faixa espectral de fissão de nêutrons prontos para cada energia;

$\chi_l(E)$ = Faixa espectral de fissão de nêutrons atrasados para cada energia;

$c_l(\vec{r}, t)$ = Concentração de precursores de nêutrons atrasados para cada grupo de precursores na posição \vec{r} e no tempo t ;

β_l = Fração de nêutrons atrasados para cada grupo de precursores;

λ_l = Constante de decaimento dos precursores de nêutrons atrasados para cada grupo de precursores.

O lado esquerdo da equação (3.1) retrata a taxa de variação da densidade de nêutrons em um elemento de volume arbitrário representado pela razão do fluxo angular de nêutrons pela velocidade do nêutron. Do lado direito da equação (3.1), o primeiro elemento mostra a taxa de fuga de nêutrons e o segundo elemento indica os nêutrons espalhados para fora da unidade de volume. A continuação da equação de transporte de Boltzmann é representada pela função $Q(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$, seu primeiro elemento indica o espalhamento de nêutrons para dentro da unidade de volume, a parcela seguinte representa a taxa de fissão de nêutrons emitidos pela fonte e o ultimo elemento retrata a concentração de precursores de nêutrons atrasados.

A equação de balanço da concentração de precursores de nêutrons apresentada em (3.2) mostra que a taxa de variação do número esperado de precursores de nêutrons atrasados é igual ao balanço entre o número de precursores decaindo na primeira parcela do lado direito da equação (3.2) pelo número de nêutrons atrasados produzidos por cada grupo g de energia na segunda parcela.

$$\phi(\vec{r}, E, t) = \int d\hat{\Omega} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \quad (3.3)$$

$$J(\vec{r}, E, t) = \int d\hat{\Omega} \hat{\Omega} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \quad (3.4)$$

Descrevendo o fluxo escalar de nêutrons da equação (3.3), como a taxa total na qual os nêutrons passam através de uma área unitária por segundo e a

densidade de corrente de nêutrons da equação (3.4), como a taxa líquida na qual os nêutrons passam através de uma superfície orientada por segundo. Podemos então fazer a primeira simplificação da equação de Boltzmann dependente do tempo, com a integração das equações (3.1) e (3.2) na variável da direção angular, obtendo a equação da continuidade de nêutrons:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{r}, E, t) &= -\nabla \cdot \mathbf{J}(\vec{r}, E, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, E, t) + q(\vec{r}, E, t) \\ q(\vec{r}, E, t) &= \int_0^{\infty} dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) + \\ &+ (1 - \beta) \chi_0(E) \int_0^{\infty} dE' v \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_l(E) c_l(\vec{r}, t) \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(\vec{r}, t) = -\lambda_l c_l(\vec{r}, t) + \beta_l \int_0^{\infty} dE v \Sigma_f(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, E, t) \quad (3.6)$$

O tratamento da variável energia é feito pela aproximação das equações com a formulação multigrupo de energia, dividindo os nêutrons em faixas de energia definidas por grupos g , com $g = 1, \dots, G$ e assim substituindo as equação (3.5) e (3.6) em cada grupo de energia, representados pelo somatório, e utilizando os adequados coeficientes de seção de choque macroscópica para cada grupo g , obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\vec{r}, t) &= -\nabla \cdot \mathbf{J}_g(\vec{r}, t) - \Sigma_{r,g}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) + q_g(\vec{r}, t) \\ q_g(\vec{r}, t) &= \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{s,gg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + (1 - \beta) \chi_{0,g} \sum_{g'=1}^G v \Sigma_{f,g'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \\ &+ \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{l,g} c_l(\vec{r}, t) \text{ com } g = 1, \dots, G \end{aligned} \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(\vec{r}, t) = -\lambda_l c_l(\vec{r}, t) + \beta_l \sum_{g=1}^G v \Sigma_{f,g}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) \text{ com } l = 1, \dots, L \quad (3.8)$$

Sendo:

G = Número total de grupos de energia;

$\Sigma_{r,g}(\vec{r}, t)$ = Seção de choque macroscópica de remoção do grupo g, na posição \vec{r} e no tempo t;

$\Sigma_{s,gg'}(\vec{r}, t)$ = Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g' para o grupo g, na posição \vec{r} e no tempo t;

$\Sigma_{f,g}(\vec{r}, t)$ = Seção de choque macroscópica de fissão do grupo g', na posição \vec{r} e no tempo t.

No entanto ainda é preciso simplificar a equação (3.7), substituindo a função de densidade de corrente de nêutrons e deixando a equação dependente de apenas da função do fluxo de nêutrons, é a aproximação P1 que permite a solução do sistema. Começando com a equação do transporte de nêutrons ela trás uma equação adicional ao sistema, possibilitando a substituição da função da densidade de corrente de nêutrons na equação (3.7) pela função fluxo de nêutrons. Considerando que o fluxo angular é linearmente anisotrópico na variável angular, de acordo com [21]:

$$\psi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \cong \frac{1}{4\pi} [\phi(\vec{r}, E, t) + 3\hat{\Omega} \cdot J(\vec{r}, E, t)] \quad (3.9)$$

E substituindo (3.9) em (3.1), temos:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} J(\vec{r}, E, t) = & -\frac{1}{3} \nabla \phi(\vec{r}, E, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E, t) J(\vec{r}, E, t) + \\ & + \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) J(\vec{r}, E', t) \end{aligned} \quad (3.10)$$

Dessa forma, apresentando a seção de choque macroscópica de transporte por $\Sigma_{tr,g}(\vec{r}, t)$ para cada grupo g, temos que:

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} dE [\Sigma_t(\vec{r}, E, t) J(\vec{r}, E, t) - \int_0^{\infty} dE' \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) J(\vec{r}, E', t)] = \Sigma_{tr,g}(\vec{r}, t) J_g(\vec{r}, t) \quad (3.11)$$

Assim, após todas as aproximações podemos simplificar a equação (3.10) para a seguinte forma:

$$\frac{1}{3} \nabla \phi_g(\vec{r}, t) + \sum_{r,g}(\vec{r}, t) J_g(\vec{r}, t) = 0 \quad (3.12)$$

Continuando com a aproximação do coeficiente de difusão para os nêutrons do grupo g definido pela equação (3.13).

$$D_g(\vec{r}, t) = \frac{1}{3 \sum_{r,g}(\vec{r}, t)} \quad (3.13)$$

Podemos então reescrever a equação (3.12) como a Lei de Fick pela equação (3.14) a seguir.

$$J_g(\vec{r}, t) = -D_g(\vec{r}, t) \nabla \phi_g(\vec{r}, t) \quad (3.14)$$

Concluindo assim a aproximação P1, substituindo a equação (3.14) na equação (3.7) temos finalmente a equação de difusão de nêutrons de grupos dependentes do tempo em (3.15) e (3.16).

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\vec{r}, t) &= \nabla \cdot D_g(\vec{r}, t) \nabla \phi_g(\vec{r}, t) - \sum_{r,g}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) + q_g(\vec{r}, t) \\ q_g(\vec{r}, t) &= \sum_{g' \neq g}^G \sum_{s,gg'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + (1 - \beta) \chi_{0,g} \sum_{g'=1}^G v \sum_{f,g'}(\vec{r}, t) \phi_{g'}(\vec{r}, t) + \\ &+ \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{l,g} c_l(\vec{r}, t) \text{ com } g = 1, \dots, G \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(\vec{r}, t) = -\lambda_l c_l(\vec{r}, t) + \beta_l \sum_{g=1}^G v \sum_{f,g}(\vec{r}, t) \phi_g(\vec{r}, t) \text{ com } l = 1, \dots, L \quad (3.16)$$

Como essa dissertação tem o objetivo de estudar a distribuição dos nêutrons dentro de um reator ADS, é necessário acrescentar a contribuição da fonte externa de nêutrons na equação (3.15). Portanto, temos em (3.17) e (3.18) a equação de difusão de nêutrons multigrupo dependente do tempo em coordenadas cartesianas para dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados.

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(x, y, z, t) = \nabla \cdot D_g(x, y, z, t) \nabla \phi_g(x, y, z, t) - \sum_{r,g} (x, y, z, t) \phi_g(x, y, z, t) +$$

$$+ q_g(x, y, z, t)$$

$$q_g(x, y, z, t) = (1 - \beta) \chi_{0,g} \sum_{g'=1}^G v \sum_{f,g'} (x, y, z, t) \phi_{g'}(x, y, z, t) +$$

$$+ \sum_{g' \neq g}^G \sum_{s,gg'} (x, y, z, t) \phi_{g'}(x, y, z, t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{l,g} c_l(x, y, z, t) + S_{ext.}(x, y, z, t)$$

com g = 1 e 2

(3.17)

$$\frac{\partial}{\partial t} c_l(x, y, z, t) = -\lambda_l c_l(x, y, z, t) + \beta_l \sum_{g'=1}^G v \sum_{f,g'} (x, y, z, t) \phi_{g'}(x, y, z, t) \quad \text{com } l = 1, \dots, 6$$

(3.18)

Para o caso estacionário com fonte externa, essas equações são simplificadas para a seguinte forma:

$$-\nabla \cdot D_g(x, y, z) \nabla \phi_g(x, y, z) + \sum_{r,g} (x, y, z) \phi_g(x, y, z) =$$

$$\chi_{0,g} \sum_{g'=1}^G v \sum_{f,g'} (x, y, z) \phi_{g'}(x, y, z) + \sum_{g' \neq g}^G \sum_{s,gg'} (x, y, z) \phi_{g'}(x, y, z) + S_{ext.}(x, y, z) \quad (3.19)$$

com g = 1 e 2

CAPÍTULO 4 - DISCRETIZAÇÃO DA CINÉTICA ESPACIAL EM 3D

4.1 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

As equações diferenciais da cinética espacial de difusão de nêutrons (3.17) e (3.18) serão discretizadas pela aproximação do método das diferenças finitas centrais [21 e 22] para o tratamento da variável espacial em uma malha fina tridimensional, com a intenção de um trato mais detalhado da distribuição de nêutrons dentro de um reator subcrítico. O passo no espaço proveniente da interpolação polinomial da série de Taylor, base do método das diferenças finitas, deve ser manipulado com cuidado para uma maior precisão, não deve ser muito pequeno, pois quanto menor mais cálculos serão necessários. Assim “para uma precisão satisfatória, o tamanho do passo no espaço deve ser da ordem do menor comprimento de difusão dos grupos” [20].

Considerando que a corrente líquida de nêutrons no grupo g pode ser caracterizada pelas correntes parciais de entrada e de saída em cada uma das superfícies do nodo. Com o sentido positivo para o lado direito e com o sentido negativo para o lado esquerdo, podemos escrever a lei de Fick da seguinte forma:

$$J_g(x, y, z, t) = J_{gu}^+(x, y, z, t) - J_{gu}^-(x, y, z, t) = -D_g(x, y, z, t) \frac{\partial}{\partial u} \phi_g(x, y, z, t) \quad (4.1)$$

E assim, podemos escrever as equações (3.17) e (3.18), com u representando as direções dos eixos cartesianos x , y e z como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(x, y, z, t) = & - \sum_u \frac{\partial}{\partial u} J_g(x, y, z, t) - \Sigma_{Rg}(x, y, z, t) \phi_g(x, y, z, t) + \\ & + (1 - \beta) \chi_{0,g} \sum_{g'=1}^G v \Sigma_{f,g'}(x, y, z, t) \phi_{g'}(x, y, z, t) + \\ & + \sum_{g' \neq g}^G \Sigma_{s,gg'}(x, y, z, t) \phi_{g'}(x, y, z, t) + \\ & + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{l,g} c_l(x, y, z, t) + S_{ext.}(x, y, z, t) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$g = 1, \dots, G$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(x, y, z, t) = \beta_l \sum_{g=1}^G v \Sigma_{fg}(x, y, z, t) \phi_g(x, y, z, t) - \lambda_l C_l(x, y, z, t) \quad (4.3)$$

$$l = 1, \dots, L$$

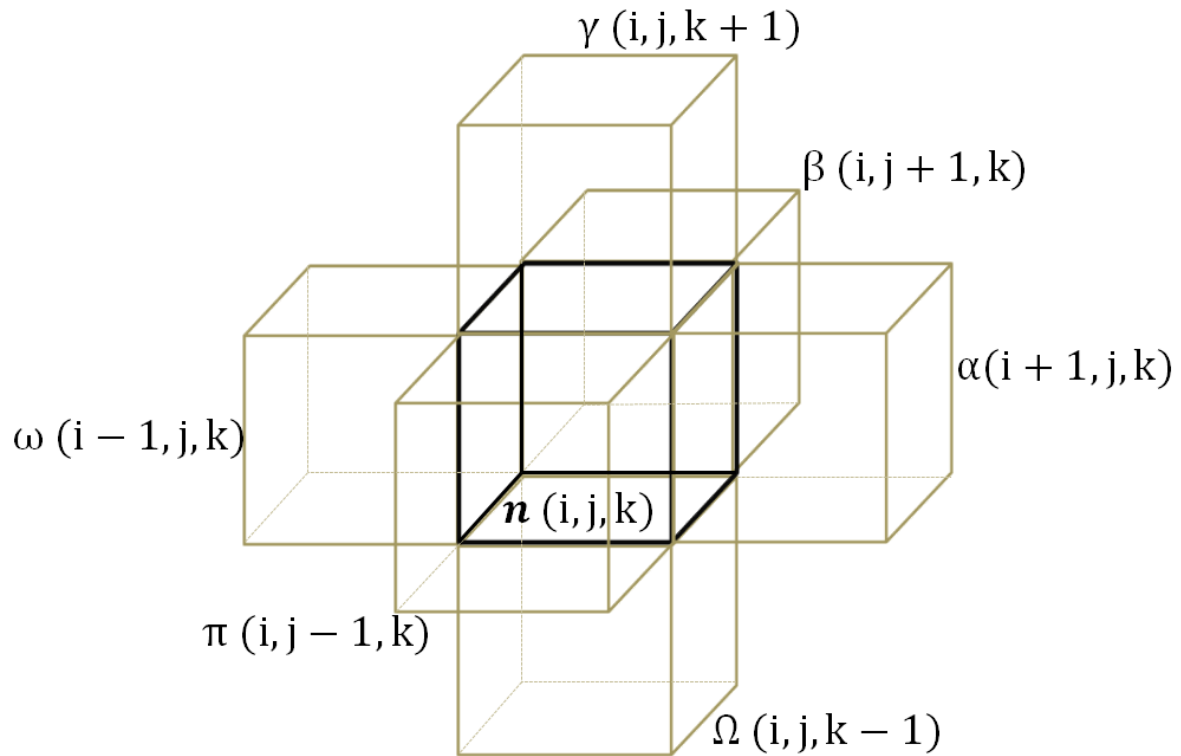


Figura 9 - Representação de um nó arbitrário n e sua vizinhança, adaptado de [23].

Rearrmando as correntes médias nas faces de um nó n qualquer como o da Figura 9, em diferenças finitas de malha fina, com a dimensão do nó na direção u representado por a_u^r , sendo r igual a i , j e k para as direções x , y e z respectivamente para os g grupos de energia, com a face direita na equação (4.4) e a face esquerda na equação (4.5).

$$J_{gu^+}^{i,j,k}(t) = -\frac{2}{a_u^r} D_g^{i,j,k}(t) (\psi_{gu^+}^{i,j,k}(t) - \phi_g^{i,j,k}(t)) \quad (4.4)$$

$$J_{gu^-}^{i,j,k}(t) = -\frac{2}{a_u^r} D_g^{i,j,k}(t) (\phi_g^{i,j,k}(t) - \psi_{gu^-}^{i,j,k}(t)) \quad (4.5)$$

Podendo então representar as correntes médias nas faces do nodo, considerando a condição de continuidade de fluxo e de corrente entre nodos para três nodos consecutivos na direção x nas equações (4.6) e (4.7), na direção y nas equações (4.8) e (4.9) e na direção z nas equações (4.10) e (4.11).

$$J_{gx+}^{i,j,k}(t) = D_{gx+}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) - D_{gx-}^{i+1,j,k}(t)\phi_g^{i+1,j,k}(t) \quad (4.6)$$

$$J_{gx-}^{i,j,k}(t) = -D_{gx-}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + D_{gx+}^{i-1,j,k}(t)\phi_g^{i-1,j,k}(t) \quad (4.7)$$

$$J_{gy+}^{i,j,k}(t) = D_{gy+}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) - D_{gy-}^{i,j+1,k}(t)\phi_g^{i,j+1,k}(t) \quad (4.8)$$

$$J_{gy-}^{i,j,k}(t) = -D_{gy-}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + D_{gy+}^{i,j-1,k}(t)\phi_g^{i,j-1,k}(t) \quad (4.9)$$

$$J_{gz+}^{i,j,k}(t) = D_{gz+}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) - D_{gz-}^{i,j,k+1}(t)\phi_g^{i,j,k+1}(t) \quad (4.10)$$

$$J_{gz-}^{i,j,k}(t) = -D_{gz-}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + D_{gz+}^{i,j,k-1}(t)\phi_g^{i,j,k-1}(t) \quad (4.11)$$

E sendo o coeficiente de difusão multigrupo definido para as três dimensões pelas equações (4.12) a (4.17):

$$D_{gx+}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \cdot D_g^{i,j,k}(t) \cdot D_g^{i+1,j,k}(t)}{a_x^{i+1} \cdot D_g^{i,j,k}(t) + a_x^i \cdot D_g^{i+1,j,k}(t)} \quad (4.12)$$

$$D_{gx-}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \cdot D_g^{i-1,j,k}(t) \cdot D_g^{i,j,k}(t)}{a_x^i \cdot D_g^{i-1,j,k}(t) + a_x^{i-1} \cdot D_g^{i,j,k}(t)} \quad (4.13)$$

$$D_{gy+}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \cdot D_g^{i,j,k}(t) \cdot D_g^{i,j+1,k}(t)}{a_y^{j+1} \cdot D_g^{i,j,k}(t) + a_y^j \cdot D_g^{i,j+1,k}(t)} \quad (4.14)$$

$$D_{gy-}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \cdot D_g^{i,j-1,k}(t) \cdot D_g^{i,j,k}(t)}{a_y^j \cdot D_g^{i,j-1,k}(t) + a_y^{j-1} \cdot D_g^{i,j,k}(t)} \quad (4.15)$$

$$D_{gz+}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \cdot D_g^{i,j,k}(t) \cdot D_g^{i,j,k+1}(t)}{a_z^{k+1} \cdot D_g^{i,j,k}(t) + a_z^k \cdot D_g^{i,j,k+1}(t)} \quad (4.16)$$

$$D_{gz^-}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \cdot D_g^{i,j,k-1}(t) \cdot D_g^{i,j,k}(t)}{a_z^k \cdot D_g^{i,j,k-1}(t) + a_z^{k-1} \cdot D_g^{i,j,k}(t)} \quad (4.17)$$

Integrando a equação (3.17) no volume $V^{i,j,k}$ de um nodo qualquer, através do operador de média integral definido em (4.18).

$$\frac{1}{V^{i,j,k}} \int_{V^{i,j,k}} (\bullet) dV \quad (4.18)$$

Considerando que os parâmetros nucleares dentro do volume são homogêneos, podemos rescrever a equação (3.17), como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{d}{dt} \phi_g^{i,j,k}(t) = & - \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^r} (J_{gu^+}^{i,j,k}(t) - J_{gu^-}^{i,j,k}(t)) - \sum_{Rg}^{i,j,k}(t) \phi_g^{i,j,k}(t) + \\ & + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \sum_{sgg'}^{i,j,k} \phi_{g'}^{i,j,k} + (1-\beta) \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \sum_{fg'}^{i,j,k}(t) \phi_{g'}^{i,j,k}(t) + \\ & + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l^{i,j,k}(t) + S_{ext.}^{i,j,k}(t) \end{aligned} \quad (4.19)$$

E adicionando adequadamente as equações (4.6) até (4.11) na equação (4.19), temos:

$$\begin{aligned} - \frac{1}{a_z^k} D_{gz^+}^{i,j,k-1}(t) \phi_g^{i,j,k-1}(t) - \frac{1}{a_y^j} D_{gy^+}^{i,j-1,k}(t) \phi_g^{i,j-1,k}(t) - \frac{1}{a_x^i} D_{gx^+}^{i-1,j,k}(t) \phi_g^{i-1,j,k}(t) - \\ - \frac{1}{a_x^i} D_{gx^-}^{i+1,j,k}(t) \phi_g^{i+1,j,k}(t) + \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^r} (D_{gu^-}^{i,j,k}(t) + D_{gu^+}^{i,j,k}(t)) \phi_g^{i,j,k}(t) - \\ - \frac{1}{a_y^j} D_{gy^-}^{i,j+1,k}(t) \phi_g^{i,j+1,k}(t) - \frac{1}{a_z^k} D_{gz^-}^{i,j,k+1}(t) \phi_g^{i,j,k+1}(t) - \\ - \sum_{Rg}^{i,j,k}(t) \phi_g^{i,j,k}(t) + \frac{1}{v_g} \frac{d}{dt} \phi_g^{i,j,k}(t) = \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$(1-\beta) \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \sum_{fg'}^{i,j,k}(t) \phi_{g'}^{i,j,k}(t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g'=g}}^2 \sum_{sgg'}^{i,j,k}(t) \phi_{g'}^{i,j,k}(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l^{i,j,k}(t) + S_{ext.}^{i,j,k}(t)$$

$$\frac{d}{dt} C_l^{i,j,k}(t) = \beta_l \sum_{g=1}^G v \sum_{fg}^{i,j,k}(t) \phi_g^{i,j,k}(t) - \lambda_l C_l^{i,j,k}(t) \quad (4.21)$$

4.1.1 Sistema Matricial

Com o auxílio da Figura 9 podemos simplificar a equação (4.20) na sua forma matricial:

$$\begin{aligned}
& -B_{n,\Omega}(t)\phi_g^{i,j,k-1}(t) - B_{n,\pi}(t)\phi_g^{i,j-1,k}(t) - B_{n,\omega}(t)\phi_g^{i-1,j,k}(t) - B_{n,n}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) - \\
& -B_{n,\alpha}(t)\phi_g^{i+1,j,k}(t) - B_{n,\beta}(t)\phi_g^{i,j+1,k}(t) - B_{n,\gamma}(t)\phi_g^{i,j,k+1}(t) - \sum_{Rg}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + \quad (4.22) \\
& + \frac{1}{\nu_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g^{i,j,k}(t) = (1 - \beta)F^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + S^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l^{i,j,k}(t) + S_{ext}^{i,j,k}(t)
\end{aligned}$$

Sendo as matrizes operadores de fissão, espalhamento, remoção e fuga para dois grupos de energia da equação (4.22) definidas como:

$$[F^{i,j,k}(t)] \equiv \begin{bmatrix} \chi_1 \nu \sum_{f1}^{i,j,k}(t) & \chi_1 \nu \sum_{f2}^{i,j,k}(t) \\ \chi_2 \nu \sum_{f1}^{i,j,k}(t) & \chi_2 \nu \sum_{f2}^{i,j,k}(t) \end{bmatrix};$$

$$[S^{i,j,k}(t)] \equiv \begin{bmatrix} 0 & \sum_{12}^{i,j,k}(t) \\ \sum_{21}^{i,j,k}(t) & 0 \end{bmatrix};$$

$$[B_{n,m}(t)] \equiv \begin{bmatrix} b_{n,m}^1(t) & 0 \\ 0 & b_{n,m}^2(t) \end{bmatrix};$$

$$[B_{n,n}(t)] \equiv \begin{bmatrix} b_{n,n}^1(t) & 0 \\ 0 & b_{n,n}^2(t) \end{bmatrix}.$$

Com

$$b_{n,n}^g(t) \equiv \sum_{Rg}^{i,j,k}(t) + \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^r} (D_{gu^-}^{i,j,k}(t) - D_{gu^+}^{i,j,k}(t)) \quad (4.23)$$

Reescrevendo agora a equação (4.22) na forma semidiscretizada matricial (4.24), sendo a matriz A uma matriz espaça e simétrica com dominância heptadiagonal.

$$\frac{d}{dt} \tilde{\Psi} = \mathbf{A} \tilde{\Psi} + \tilde{\mathbf{S}} \quad (4.24)$$

Temos que a equação de difusão de nêutrons em três dimensões semidiscretizada pelo método das diferenças finitas fica:

$$[v]^{-1} \frac{d}{dt} \tilde{\Phi}(t) + [B(t)] \tilde{\Phi}(t) = [S(t)] \tilde{\Phi}(t) + (1 - \beta)[F(t)] \tilde{\Phi}(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l c_{\sim l}(t) + S_{\sim ext.}(t) \quad (4.25)$$

$$\frac{d}{dt} c_{\sim l}(t) = \beta_l [F(t)] \tilde{\Phi}(t) - \lambda_l c_{\sim l}(t), \quad l = 1, \dots, L, \quad (4.26)$$

Sendo as matrizes das equações (4.25) e (4.26) definidas como:

$$\tilde{\Phi}(t) \equiv \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix}, \quad \text{com } \phi_{\sim g}(t) \equiv \begin{pmatrix} \phi_g^1(t) \\ \vdots \\ \phi_g^n(t) \\ \vdots \\ \phi_g^N(t) \end{pmatrix};$$

$$c_{\sim l}(t) \equiv \begin{pmatrix} \chi_{1,l}^r C_{\sim l}^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{1,l}^r C_{\sim l}^N(t) \\ \chi_{2,l}^r C_{\sim l}^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{2,l}^r C_{\sim l}^N(t) \end{pmatrix};$$

$$[S_{\sim ext.}(t)] \equiv \text{coluna} \begin{bmatrix} S_{\sim 1} \\ S_{\sim 2} \\ \dots \\ S_{\sim g} \\ \dots \\ S_{\sim G} \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$[v]^{-1} = \begin{bmatrix} 1/\nu_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1/\nu_1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1/\nu_2 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1/\nu_2 \end{bmatrix}_{2N \times 2N} ;$$

$$[F(t)] \equiv \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ [F_{21}(t)] & [F_{22}(t)] \end{bmatrix};$$

$$[S(t)] \equiv \begin{bmatrix} 0 & [S_1(t)] \\ [S_2(t)] & 0 \end{bmatrix};$$

$$[B(t)] \equiv \begin{bmatrix} [B_1(t)] & 0 \\ 0 & [B_2(t)] \end{bmatrix};$$

Com

$$[B_g(t)] \equiv \begin{pmatrix} b_{1,1}^g & b_{1,2}^g & & & b_{1,n}^g & & & b_{1,N-1}^g & & \\ b_{2,1}^g & b_{2,2}^g & b_{2,3}^g & & & & b_{2,n+1}^g & & & b_{2,N}^g \\ & b_{3,2}^g & b_{3,3}^g & \ddots & & & & & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & & & & & & \\ b_{n,1}^g & & & & b_{n-1,n}^g & & & & b_{n-1,N-1}^g & \\ & & & & b_{n,n}^g & \ddots & & & & b_{n,N}^g \\ & b_{n+1,2}^g & & & b_{n+1,n}^g & \ddots & & & & \\ & & \ddots & & & \ddots & & & & \\ b_{N-1,1}^g & & & & b_{N-1,n-1}^g & & & b_{N-2,N-2}^g & b_{N-2,N-1}^g & \\ & & & & & & & b_{N-1,N-2}^g & b_{N-1,N-1}^g & b_{N-1,N}^g \\ & b_{N,1}^g & & & b_{N,n}^g & & & & b_{N,N-1}^g & b_{N,N}^g \end{pmatrix};$$

$$[S_g(t)] = \begin{bmatrix} \sum_{gg'}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{gg'}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sum_{gg'}^N(t) \end{bmatrix} \quad \text{para } g \neq g' \text{ com } g=1,2 \text{ e } g'=1,2;$$

$$[F_{gg}(t)] = \chi_g \begin{bmatrix} \nu \Sigma_{fg}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu \Sigma_{fg}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu \Sigma_{fg}^N(t) \end{bmatrix} \quad \text{com } g=1,2;$$

$$[F_{gg'}(t)] = \chi_g \begin{bmatrix} \nu \Sigma_{fg'}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu \Sigma_{fg'}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu \Sigma_{fg'}^N(t) \end{bmatrix} \quad \text{com } g=1,2 \text{ e } g'=1,2.$$

É possível ainda simplificar as equações matriciais (4.25) e (4.26) levando em consideração a condição de contorno com valores conhecidos para $\phi_g(0)$ e $C_l(0)$ como sendo nulas, considerando também que não existe “upscattering” e que $\chi_1 = 1$, $\chi_2 = 0$, $\chi_{1,l}^r = 1$ e $\chi_{2,l}^r = 0$, e as matrizes operadores da fissão e do espalhamento se tornam:

$$[F(t)] = \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ 0 & 0 \end{bmatrix};$$

$$[S(t)] = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ [S_{21}(t)] & 0 \end{bmatrix}.$$

E finalmente chegamos à equação semidiscretizada da difusão dos nêutrons em três dimensões para dois grupos de energia com fonte externa de nêutrons em (4.27) e (4.28).

$$[v]^{-1} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} = - \begin{bmatrix} [B_1(t)] - (1-\beta)[F_{11}(t)] & -(1-\beta)[F_{12}(t)] \\ -[S_{21}(t)] & [B_2(t)] \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} + \sum_{l=1}^L \lambda_l \begin{pmatrix} C_{\sim l}(t) \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} S_{\sim 1, ext.}(t) \\ S_{\sim 2, ext.}(t) \end{pmatrix} \quad (4.27)$$

$$\frac{d}{dt} \tilde{C}_l(t) = \beta_l \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi(t) \\ \tilde{\phi}_1(t) \\ \tilde{\phi}_2(t) \end{pmatrix} - \lambda_l \tilde{C}_l(t) \quad (4.28)$$

4.2 DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

O tratamento da variável tempo na equação semidiscretizada da difusão dos nêutrons com fonte externa será iniciada com a integração analítica da equação dos precursores de nêutrons atrasados em (4.28), usado posteriormente para a discretização no tempo da equação (4.27), o que conseqüentemente diminui a dificuldade da resolução do sistema por que diminui a quantidade de equações.

A discretização temporal da equação de difusão de nêutrons com fonte externa em (4.27) será feito através do método tradicional numérico implícito de Euler. O método de Euler implícito é uma variação do método Theta para uma matriz diagonal unitária. Esse processo conduz a um sistema que necessita inverter matriz, no entanto, o esforço computacional exigido para a inversão da matriz se justifica por que o processo desse método resulta em um sistema incondicionalmente estável.

Assumindo que a fonte de fissão varia linearmente ao longo de cada intervalo de tempo $\Delta t = t_\tau + t_{\tau+1}$, com τ sendo o contador de números de passos, conforme pode ser visto na Figura 10,

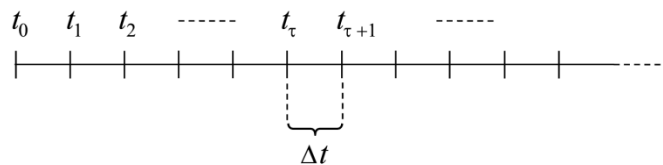


Figura 10 - Esquema discretização temporal de [23].

podemos escrever a equação (4.28) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \underset{\sim l}{C}(t) = -\lambda_l \underset{\sim l}{C}(t) + \beta_l \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^\tau \begin{pmatrix} \phi \\ \sim 1 \\ \phi \\ \sim 2 \end{pmatrix}^\tau + \\ + \frac{\beta_l}{\Delta t} (t - t_\tau) \left\{ \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{\tau+1} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim 1 \\ \phi \\ \sim 2 \end{pmatrix}^{\tau+1} - \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^\tau \begin{pmatrix} \phi \\ \sim 1 \\ \phi \\ \sim 2 \end{pmatrix}^\tau \right\}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

E integrando a equação (4.29) dentro do intervalo Δt temos que:

$$\begin{aligned} \underset{\sim l}{C}^{(\tau+1)} = \underset{\sim l}{C}^{(\tau)} e^{-\lambda_l \Delta t} + \beta_l \left\{ a_l \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{(\tau+1)} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim 1 \\ \phi \\ \sim 2 \end{pmatrix}^{(\tau+1)} + \right. \\ \left. + b_l \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{(\tau)} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim 1 \\ \phi \\ \sim 2 \end{pmatrix}^{(\tau)} \right\}, \end{aligned} \quad (4.30)$$

$$\text{Com os coeficientes } a_l = \frac{(1 + \lambda_l \Delta t)(1 - e^{-\lambda_l \Delta t})}{\lambda_l^2 \Delta t} - \frac{1}{\lambda_l} \text{ e } b_l = \frac{\lambda_l \Delta t - 1 + e^{-\lambda_l \Delta t}}{\lambda_l^2 \Delta t}.$$

Usando agora o método de Euler implícito para discretização temporal da equação de difusão de nêutrons com fonte externa de (4.27), temos:

$$\left([I] - \Delta t [A]^{(\tau+1)} \right) \underset{\sim}{\Phi}^{(\tau+1)} = \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \underset{\sim}{C}^{(\tau+1)} + \underset{\sim}{S}_{ext}. \quad (4.31)$$

Com as matrizes colunas:

$$\underset{\sim}{\Phi} \equiv \begin{pmatrix} \phi \\ \sim 1 \\ \phi \\ \sim 2 \end{pmatrix}, \quad \underset{\sim}{C} \equiv \begin{pmatrix} C \\ \sim l \\ 0 \\ \sim \end{pmatrix}, \quad \underset{\sim}{S}_{ext.} \equiv \begin{pmatrix} S \\ \sim 1 \\ S \\ \sim 2 \end{pmatrix}.$$

E com a matriz do operador A:

$$[A] \equiv \begin{bmatrix} \nu_1 (-[B_1] + (1 - \beta)[F_{11}]) & \nu_1 (1 - \beta)[F_{12}] \\ \nu_2 [S_{21}] & -\nu_2 [B_2] \end{bmatrix}.$$

Substituindo por fim a equação (4.30) na (4.31) temos o seguinte sistema matricial linear:

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau+1)} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau)} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} \begin{pmatrix} C \\ \sim_l \\ 0 \\ \sim \end{pmatrix}^{(\tau)} + \begin{pmatrix} \nu_1 \Delta t S_1 \\ \sim \\ \nu_2 \Delta t S_2 \\ \sim \end{pmatrix} \quad (4.32)$$

Sendo as supermatrizes de matrizes quadradas da equação (4.32) definidas como:

$$T_{11} = [I] - \Delta t [A_{11}]^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l [F_{11}]^{(\tau+1)}$$

$$T_{12} = -[A_{12}]^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l [F_{12}]^{(\tau+1)}$$

$$T_{21} = -[A_{21}]^{(\tau+1)}$$

$$T_{22} = [I] - \Delta t [A_{22}]^{(\tau+1)}$$

$$R_{11} = [I] + \Delta t [A_{11}]^{(\tau)} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l [F_{11}]^{(\tau)}$$

$$R_{12} = \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l [F_{12}]^{(\tau)}$$

$$R_{21} = [A_{21}]^{(\tau)}$$

$$R_{22} = [I] + \Delta t [A_{22}]^{(\tau)}$$

A matriz dos coeficientes da equação matricial linear final é uma matriz simétrica de diagonal dominante, ideal para métodos iterativos e pode ser resolvida diretamente através da decomposição LU.

CAPÍTULO 5 - RESULTADOS

5.1 VALIDAÇÃO DO MÉTODO NUMÉRICO

Para testar o método numérico foi implementado um código computacional programado na linguagem FORTRAN. O código resolve iterativamente as equações da cinética espacial com ou sem fonte externa de nêutrons na geometria tridimensional para dois grupos de energia e em até seis grupos de precursores. Além disso, outro código computacional foi desenvolvido para resolver a equação de difusão para o problema estacionário com ou sem fonte externa de nêutrons em geometria tridimensional para dois grupos de energia, fornecendo os fluxos de nêutrons estacionários e o fator de multiplicação, permitindo uma análise do nível de sub-criticalidade do núcleo.

Para validar os códigos desenvolvidos, um núcleo inteiro homogêneo na forma de um cubo de 200 cm de aresta, sem refletor, com dois grupos de energia e um grupo de precursores foi considerado [24]. As propriedades da composição nuclear e os dados cinéticos são apresentados na Tabela 3. A discretização espacial em diferenças finitas adotada foi $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 10$ cm, com vinte planos radiais, cada plano com 400 nodos, totalizando 8000 nodos. Foi permitida uma malha de 10 cm, pois o comprimento de difusão para este reator é de 14 cm e foi utilizada a condição de contorno de fluxo nulo. No cálculo estacionário sem fonte externa, foi encontrado um $k_{ef} = 0,893508$, que corresponde a um desvio relativo percentual de 0,002% quando comparado ao valor exato (0,895285) da solução analítica para um grupo de precursores. Na simulação do transiente foi considerada uma perturbação de passo uniforme, onde a seção de choque de absorção no grupo térmico é reduzida em um valor de $0,369 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$. O fluxo inicial é dado pelo fluxo do cálculo estacionário sem fonte externa, equação (3.19), e a concentração de precursores inicial é dada pela equação (4.21) considerando a derivada temporal nula. O transiente durou 0,4s e a discretização temporal foi $\Delta t = 0,001$ s. Na Tabela 4, na posição central da malha, os resultados obtidos pelo código são comparados com a solução exata que pode ser encontrada em [25]. A comparação é feita com o fluxo

térmico no ponto central do reator, onde no momento inicial esse fluxo é normalizado para a unidade (segunda coluna). Verifica-se que o desvio relativo percentual é inferior a 0,5 % durante o transiente.

Tabela 3 - Reator cubo homogêneo - Parâmetros nucleares e cinéticos.

Tipo	g	$D_g (cm)$	$\Sigma_{ag} (cm)^{-1}$	$\nu \Sigma_{fg} (cm)^{-1}$	$\Sigma_{gg} (cm)^{-1}$	$\nu_g (cm/s)$
1	1	1,35062	0,001382	0,0005822	0,0023	$3,0 \times 10^7$
	2	1,08085	0,0054869	0,0098328	0,0	$2,2 \times 10^5$

$\lambda_1 = 0,08 s^{-1}$, $\beta_1 = 0,0064$ e $\nu = 2,41$ nêutrons / fissão

Tabela 4 - Reator cubo homogêneo - Fluxo térmico normalizado.

Tempo(s)	Exato	Calculado	Desvio(%)
0,00	1,0000	1,0000	-
0,10	1,7243	1,7167	0,44
0,20	2,3162	2,3077	0,37
0,30	2,8039	2,7949	0,33
0,40	3,2108	3,2015	0,29

Nas Figuras 11 e 12 são mostrados os fluxos rápidos e térmicos dos planos centrais do reator homogêneo no momento inicial e nas Figuras 13 e 14 são mostrados os fluxos rápidos e térmicos no instante final.

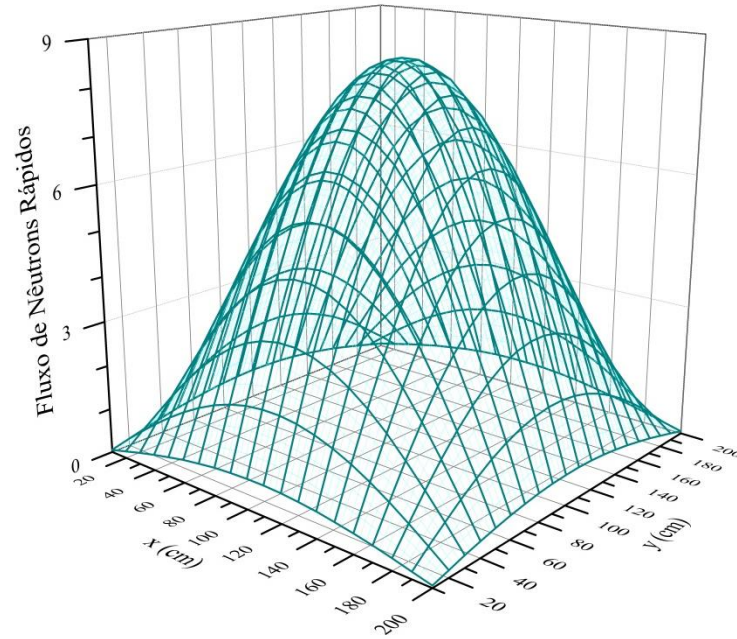


Figura 11 - Fluxo de nêutrons rápidos em $t=0s$.

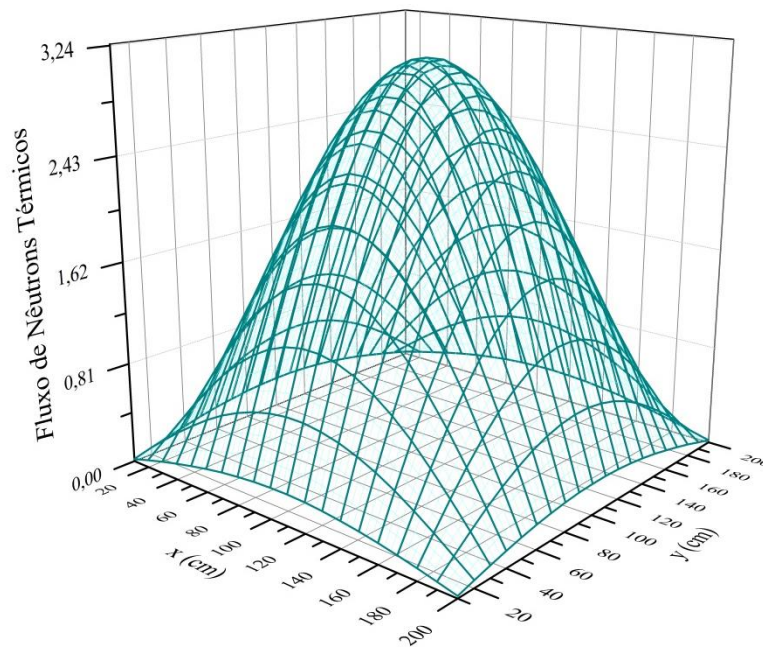


Figura 12 - Fluxo de nêutrons térmicos em $t=0s$.

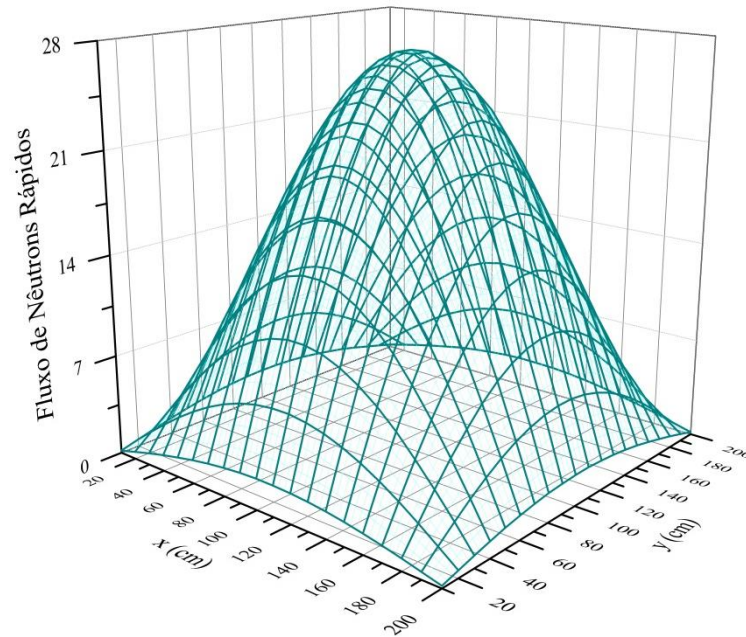


Figura 13 - Fluxo de nêutrons rápidos em $t=4s$.

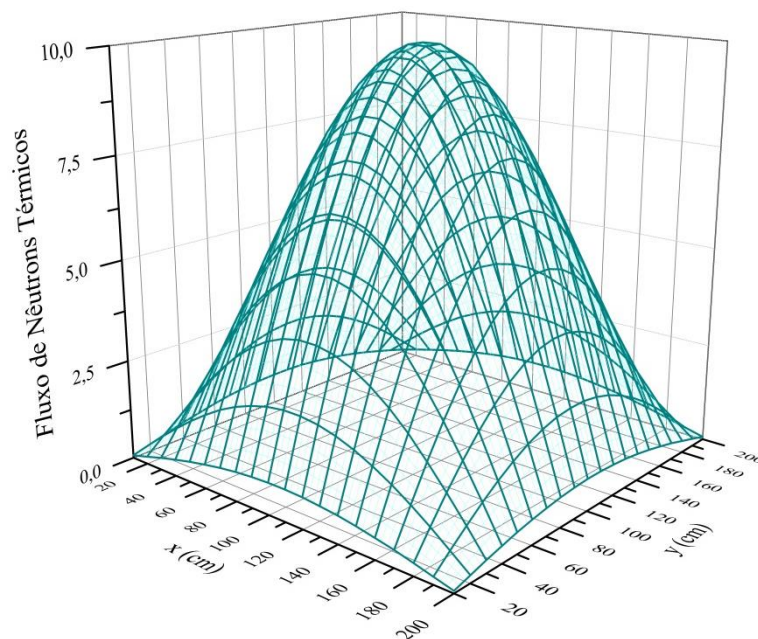


Figura 14 - Fluxo de nêutrons térmicos em $t=4s$.

5.2 ANÁLISE DE TRANSIENTES EM ADS 3D

Nesta seção, os códigos computacionais foram usados para analisar alguns dos tipos de transientes causados pela fonte externa de nêutrons em sistemas subcríticos ADS em geometria tridimensional. Dois tipos de transientes associados

aos sistemas ADS foram simulados com enfoque nas perturbações do acelerador de prótons, causando variações na intensidade do feixe de prótons e, conseqüentemente, na intensidade da fonte externa de nêutrons. O primeiro transiente corresponde à interrupção no feixe do acelerador de prótons (ABI) por um curto período de tempo e o segundo transiente a ser abordado descreve a ocorrência de uma sobre potência no feixe do acelerador de prótons (ABO) [3], [4], [26] e [27].

Em ambos os casos essa fonte de nêutrons, que representa a fonte de “spallation” bombardeada por um feixe de prótons, pode ser aproximada como uma fonte de intensidade constante, pois o feixe de prótons empregado nos reatores ADS é produzido por ondas contínuas (CW) que operam em uma frequência muito alta, acima de 170 MHz [4]. Nos casos de transientes que serão abordados nas próximas seções, foi adotada uma fonte externa de nêutrons com intensidade constante igual a 10^{14} nêutrons/s tanto para o grupo rápido quanto para o grupo térmico de energia.

Para simular os transientes foram considerados dois tipos de núcleos subcríticos de reatores: o reator com núcleo homogêneo cúbico, que foi apresentado na seção anterior, e um núcleo modificado baseado no problema apresentado por [28]. Nos dois núcleos simulados os cálculos estacionário e cinético utilizaram uma tolerância de $\varepsilon = 10^{-8}$ e com o seguinte critério de parada no processo iterativo:

$$\left| \frac{\phi_{\sim g}^{iter+1} - \phi_{\sim g}^{iter}}{\phi_{\sim g}^{iter+1}} \right| \leq \varepsilon$$

onde *iter* é o índice de iteração.

5.2.1 Caso 1 - Reator cubo homogêneo

Neste caso o reator ADS tridimensional tem sua geometria e parâmetros nucleares e cinéticos iguais aos mencionados acima, sendo considerada uma fonte externa de nêutrons localizada geometricamente no centro do reator e sob a forma de um pequeno cubo de 20 cm de borda. Os parâmetros para as discretizações espacial e temporal foram os mesmos já adotados: $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 10$ cm e $\Delta t = 0,001$ s. O fluxo inicial é dado pelo fluxo do cálculo estacionário com fonte externa e

a concentração de precursores inicial é dada pela equação 4.21 considerando a derivada temporal nula e, como anteriormente, e foi utilizada a condição de contorno de fluxo nulo.

5.2.1.1 Interrupção do Feixe do Acelerador (ABI)

Neste transiente, o reator está operando sob a ação do feixe de prótons do acelerador e, repentinamente, o feixe de prótons do acelerador é interrompido no instante em 1s e após 2s o feixe é restabelecido. A Figura 15 e a Figura 16 ilustram o comportamento dos fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no instante em 1s, no início da ABI, e as Figura 17 e Figura 18 mostram os fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no instante em 3s, no final da ABI. A Figura 19 mostra o comportamento da potência relativa, considerando uma simulação com a duração de 10s.

Os resultados obtidos na simulação do ABI são muito semelhantes aos obtidos em simulações do ABI usando um reator do tipo “Slab” [3] e [27], e também em simulações considerando um reator em geometria bidimensional [4] e [26].

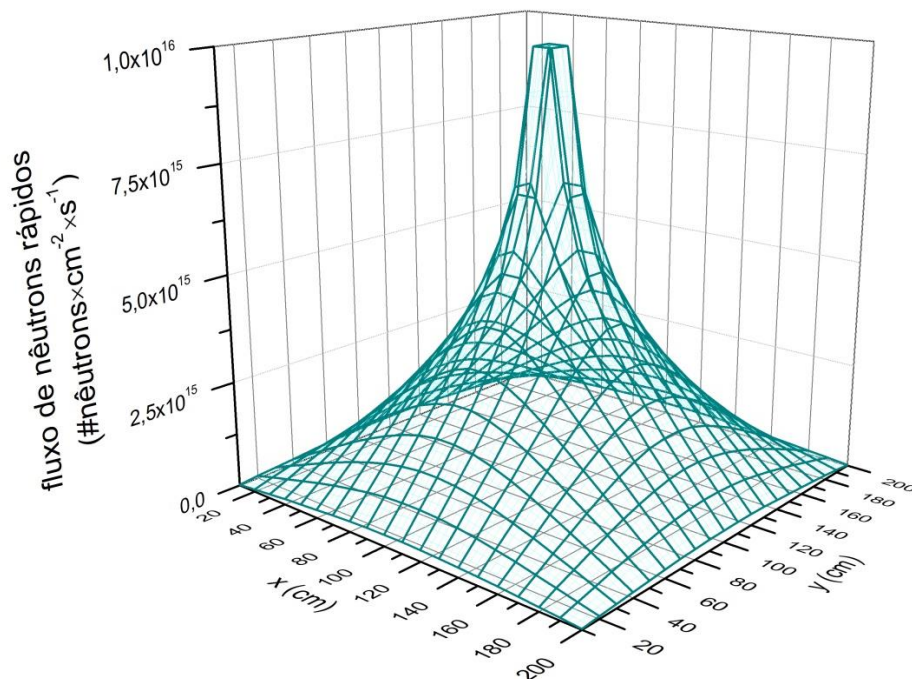


Figura 15 - Fluxo de nêutrons rápidos em t=1s.

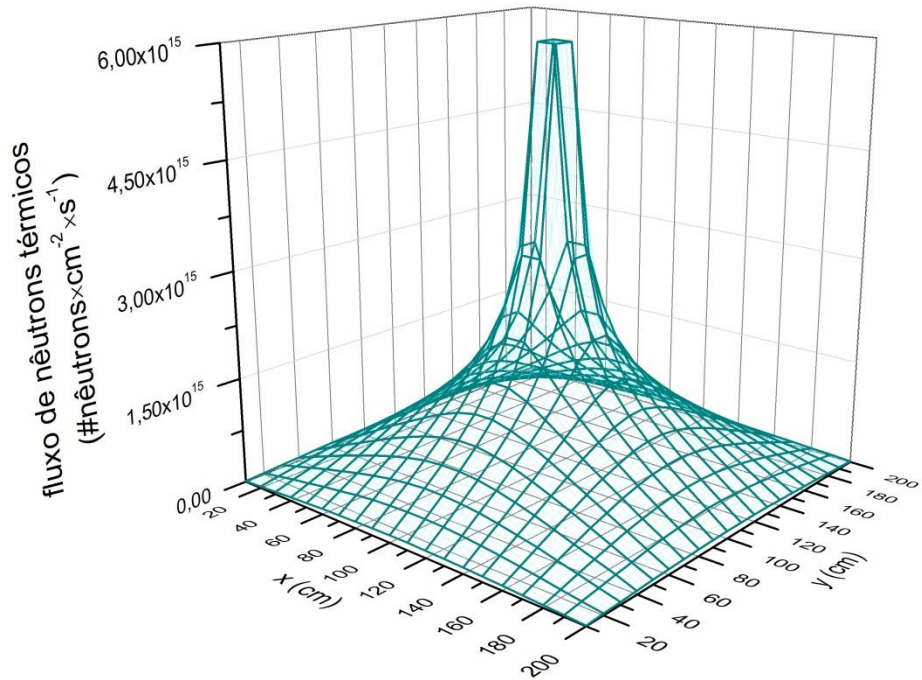


Figura 16 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos em t=1s.

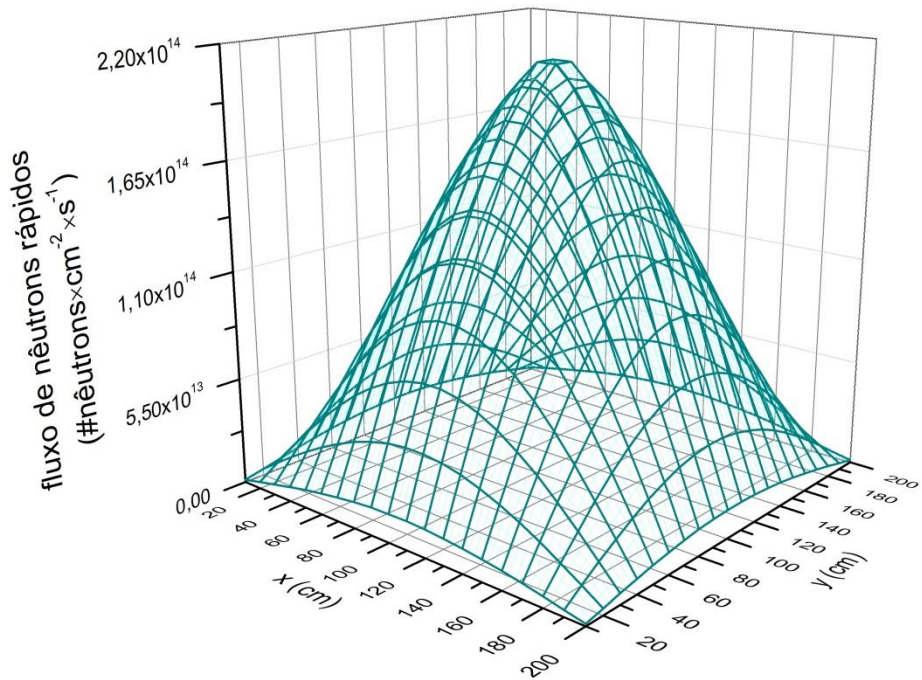


Figura 17 - ABI - Fluxo de nêutrons rápidos em t=3s.

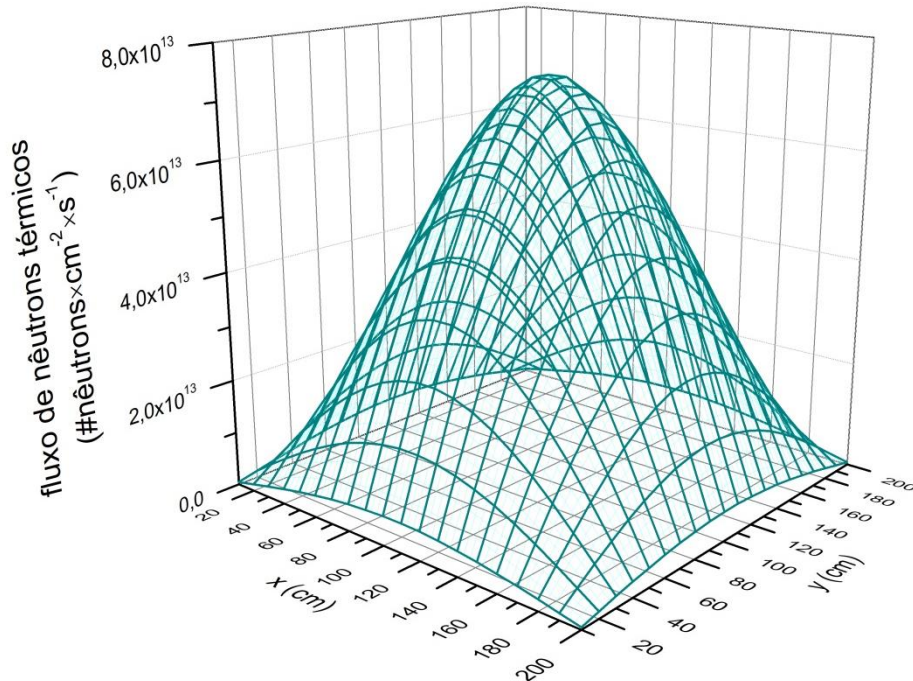


Figura 18 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos em t=3s.

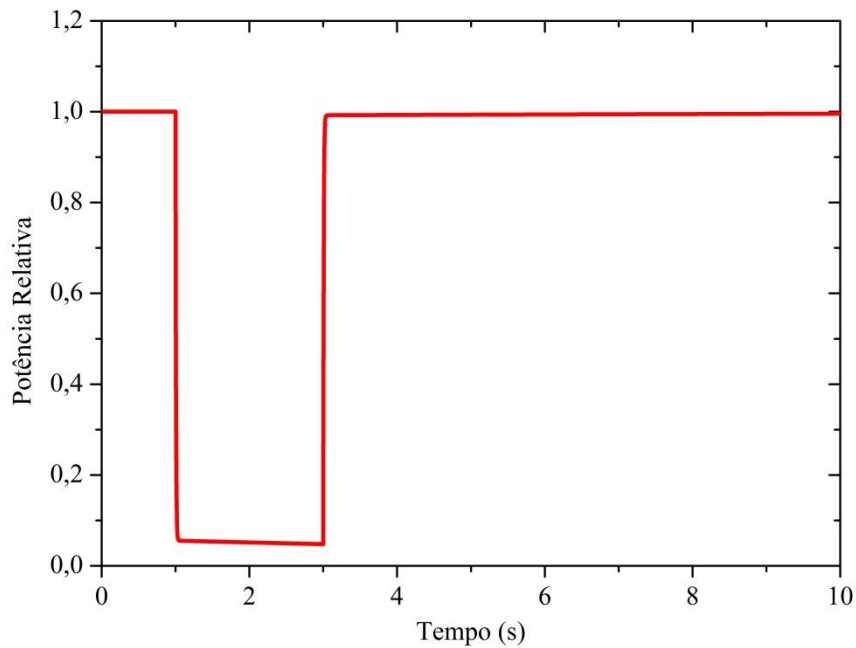


Figura 19 - ABI - Variação da potência relativa.

Com a interrupção do feixe de prótons no instante em 1 s, observa-se uma mudança abrupta na potência, com uma redução de 94% em 0,04s, e também ocorre uma mudança abrupta no nível de potência em 3s. Além disso, observa-se

que entre esses instantes a potência é reduzida lentamente em 15,9% devido à subcriticalidade do reator do sistema ADS.

5.2.1.2 Sobre potência do feixe do acelerador (ABO)

Neste transiente a intensidade do feixe de prótons do acelerador é aumentada em 100% instantaneamente e após 2 s o feixe tem a sua intensidade restaurada ao nível inicial. A Figura 20 e a Figura 21 mostram os fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no instante em 3 s, no final do ABO. O comportamento da potência relativa no transiente ABO, considerando uma simulação com duração de 10 s, pode ser verificado na Figura 22.

Da mesma forma que no transiente ABI, os resultados obtidos na simulação do transiente ABO são muito semelhantes aos resultados obtidos nas simulações de ABO em um reator do tipo “Slab” obtidas nas referências [3] e [27] bem como em simulações em um reator com geometria bidimensional implementadas nas referências [4] e [26].

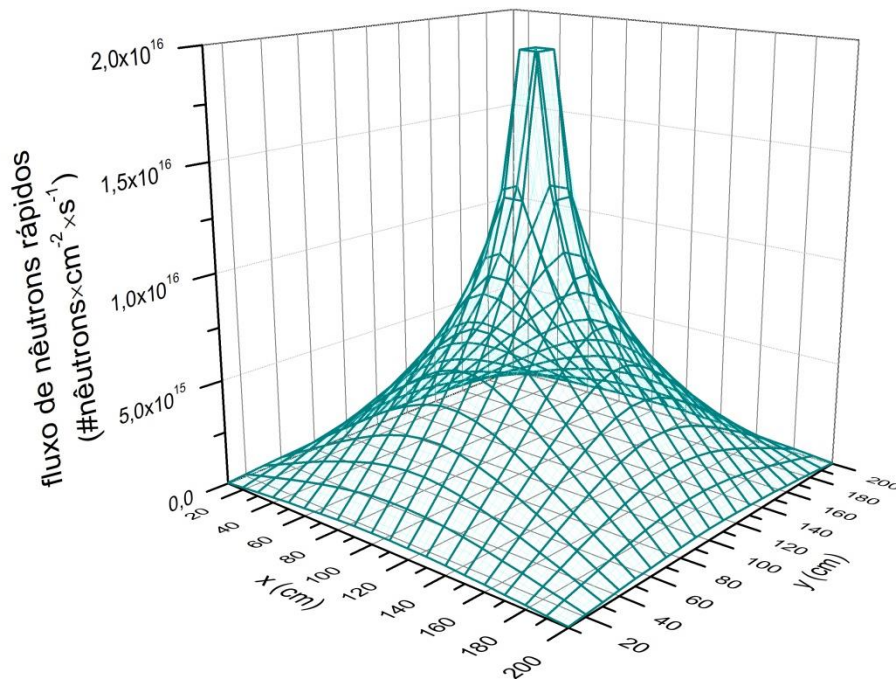


Figura 20 - ABO - Fluxo de nêutrons rápidos, t=3s.

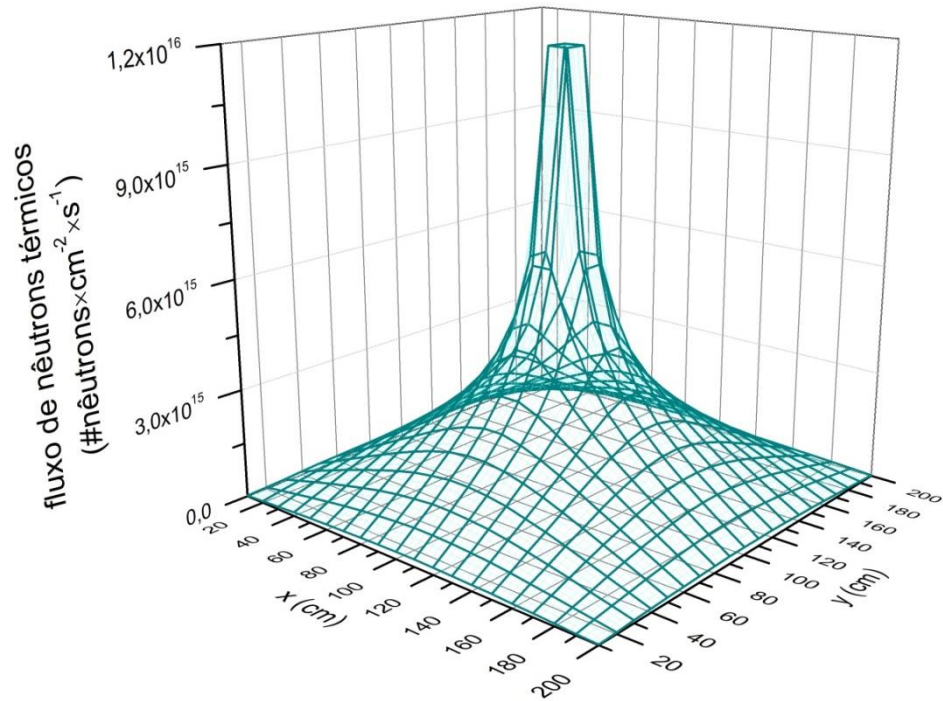


Figura 21 - ABO - Fluxo de nêutrons térmicos, t=3s.

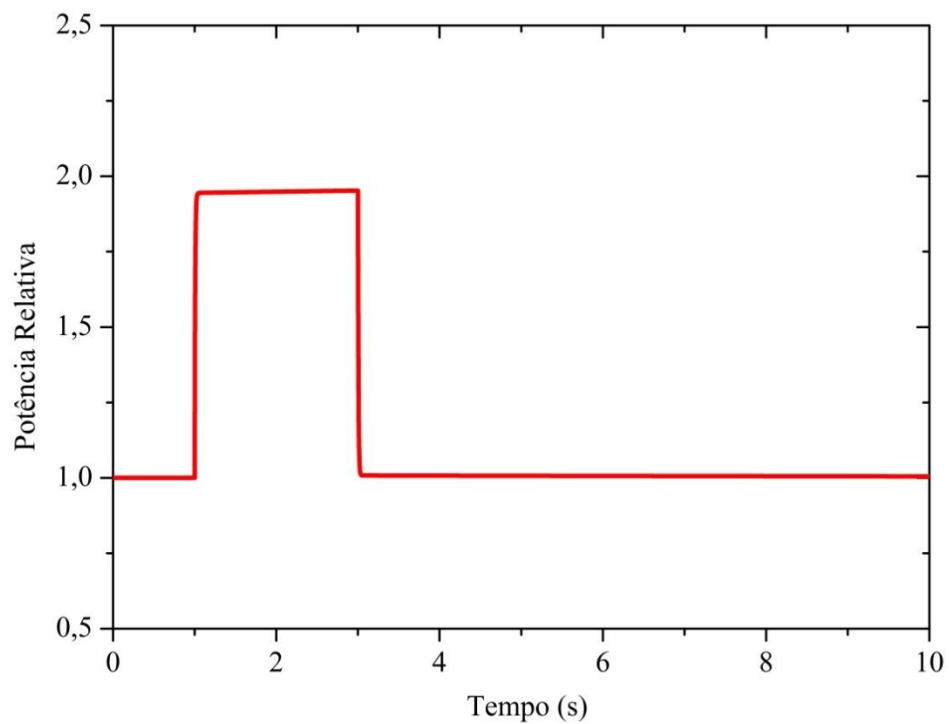


Figura 22 - ABO - Variação da potência relativa.

Com o aumento da intensidade do feixe de prótons do acelerador no instante em 1 s, uma variação instantânea da potência relativa é observada, com um

aumento de 94% em 0,04s. Com o acelerador operando em intensidade normal, o reator ADS opera no modo crítico e, portanto, com um aumento na intensidade do feixe, o reator começa a operar supercrítico. Assim, pode-se observar um tênue aumento de 0,43% da potência entre os instantes 1s e 3 s.

5.2.2 Caso 2 - Reator LMW modificado

Este caso corresponde a uma versão modificada do problema que foi originalmente introduzido por Langenbuch, Maurer e Werner (LMW) representando um modelo simplificado de PWR tridimensional com 77 elementos combustíveis [28]. São considerados dois grupos de energia, seis grupos de precursores de nêutrons retardados e simetria de um quarto de núcleo. A composição do núcleo e os dados cinéticos são apresentados na Tabela 5, onde, na coluna cinco, os valores de número médio de nêutrons emitidos pela seção de choque macroscópica de fissão para cada grupo de energia já estão multiplicados. Alguns dos parâmetros nucleares listados na Tabela 5 foram modificados com relação aos valores do problema original, para se obter um $k_{ef} = 0,95026393$ e um comprimento de difusão igual a 4,032 cm. A geometria do núcleo é mostrada nas Figuras 23 e 24. A discretização espacial em diferenças finitas adotada foi $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 4$ cm, com cinquenta planos radiais, cada plano com 759 nodos, totalizando 37.950 nodos. O fluxo inicial é dado pelo fluxo do cálculo estacionário sem fonte externa, equação (3.19), e a concentração de precursores inicial é dada pela equação (4.21) considerando a derivada temporal nula e, como anteriormente, foi utilizada a condição de contorno de fluxo nulo.

5.2.2.1 Interrupção do feixe do acelerador (ABI)

Neste transiente, o reator está operando sob a ação do feixe de prótons do acelerador e, de forma abrupta, o feixe de prótons do acelerador é interrompido no instante em 1s e após 2s o feixe é restabelecido. A Figura 25 e a Figura 26 ilustram o comportamento dos fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no instante em 1s, no início da ABI, e as Figura 27 e Figura 28 mostram os fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no instante em 3s, no final da ABI, obtidos no plano de número 25 próximo

ao centro do reator. A Figura 29 mostra o comportamento da potência relativa, considerando uma simulação com a duração de 10s.

Tabela 5 - Reator LMW - Parâmetros nucleares e cinéticos de multigrupo.

Tipo	g	$D_g (cm)$	$\Sigma_{ag} (cm)^{-1}$	$\nu \Sigma_{fg} (cm)^{-1}$	$\Sigma_{gg'} (cm)^{-1}$	$\nu_g (cm/s)$
1	1	1,423913	0,01040206	0,006477691	0,01755555	$1,25 \times 10^7$
	2	0,356306	0,0219155425	0,027329167	0,0	$2,5 \times 10^5$
2	1	1,425611	0,01099263	0,007503284	0,01717768	$1,25 \times 10^7$
	2	0,350574	0,019851268	0,01378004	0,0	$2,5 \times 10^5$
Refl.	1	1,634227	0,002660573	0,0	0,02759693	$1,25 \times 10^7$
	2	0,264002	0,0123408775	0,0	0,0	$2,5 \times 10^5$
Prec.	grupo 1	grupo 2	grupo 3	grupo 4	grupo 5	grupo 6
β_l	0,000247	0,0013845	0,001222	0,0026455	0,000832	0,000169
$\lambda_l (s)^{-1}$	0,0127	0,0317	0,115	0,311	1,4	3,87

Energia liberada por fissão: $3,204 \times 10^{-11}$ (Ws) e $\nu = 2,5$ nêutrons/fissão.

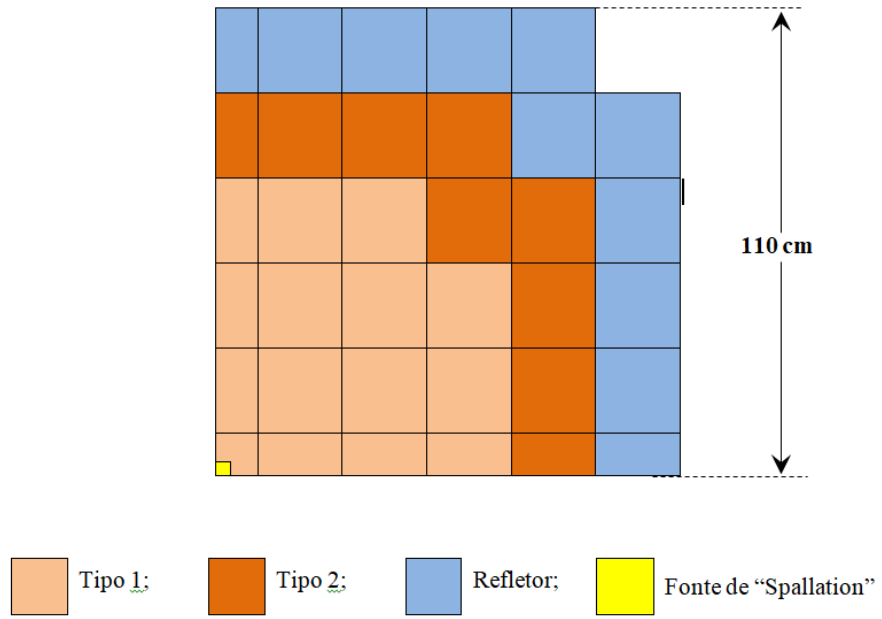


Figura 23 - Reator LMW modificado - Geometria radial.

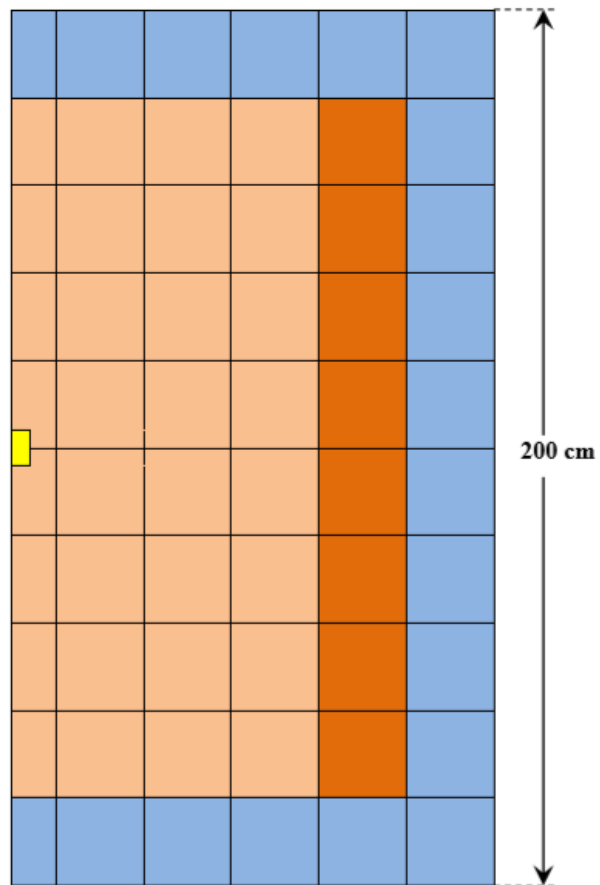


Figura 24 - Reator LMW modificado - Geometria axial.

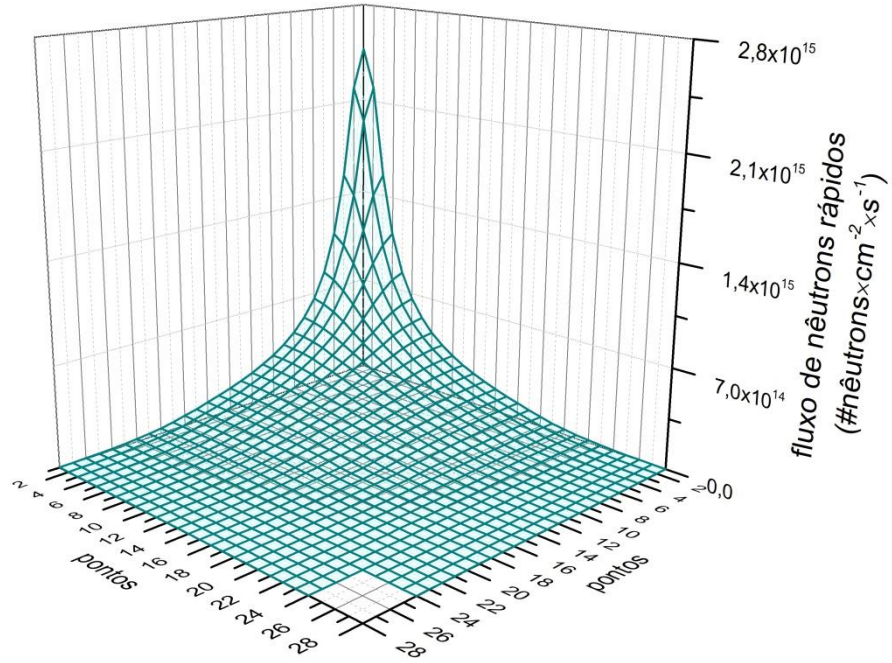


Figura 25 - ABI - Fluxo de nêutrons rápidos, t=1s.

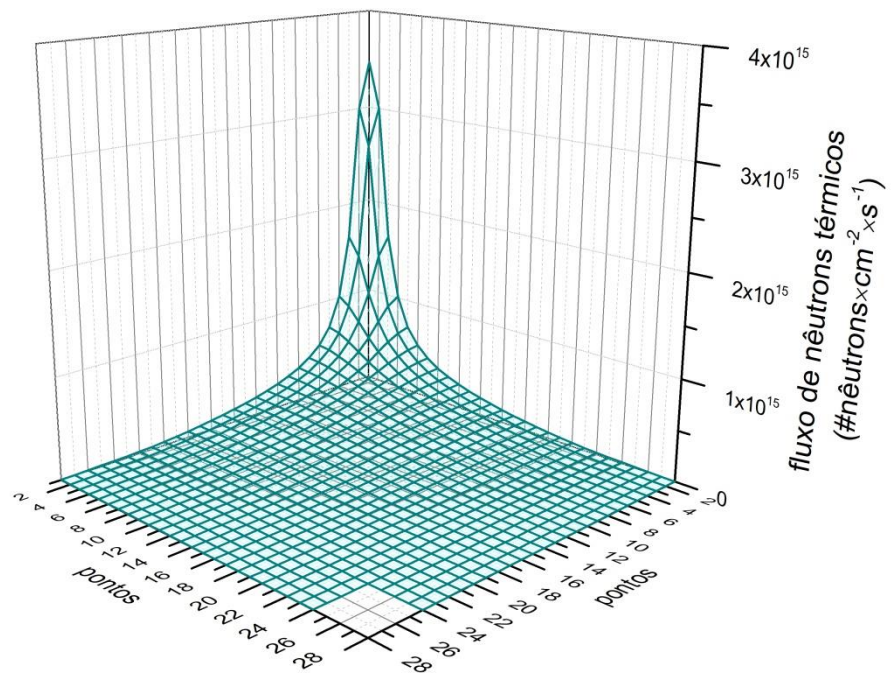


Figura 26 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos, t=1s.

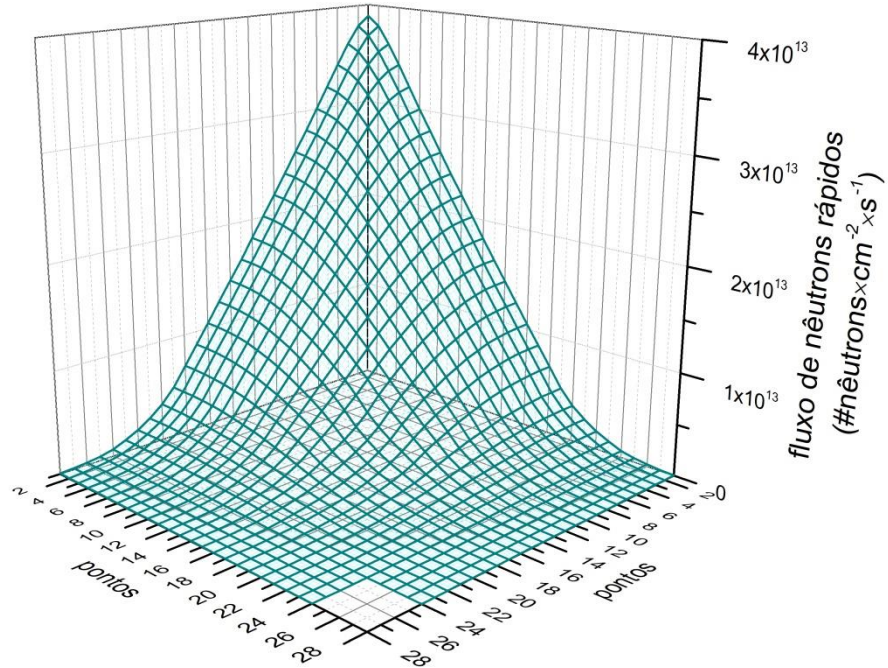


Figura 27 - ABI - Fluxo de nêutrons rápidos, t=3s.

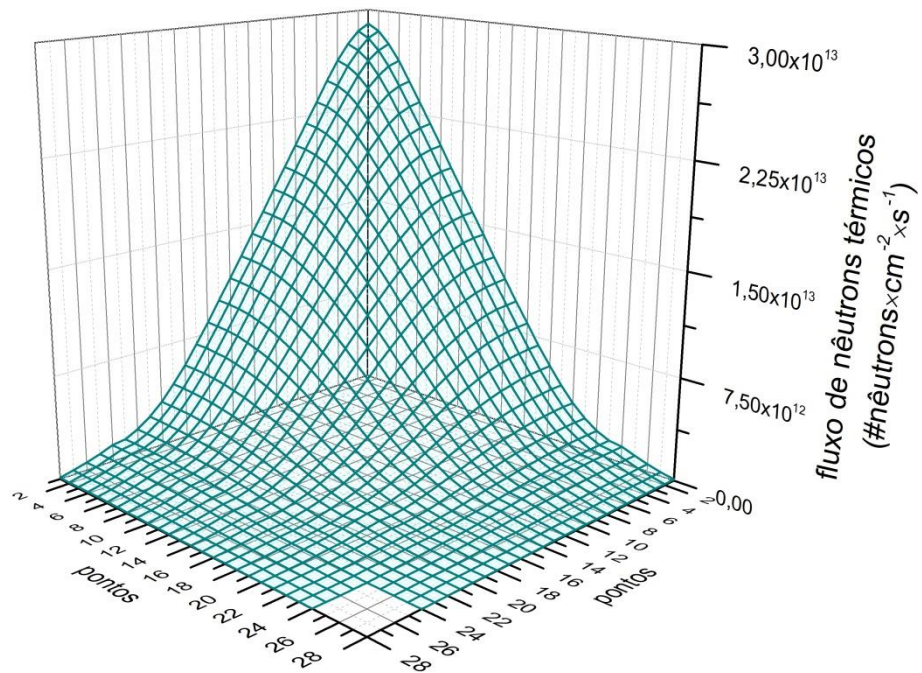


Figura 28 - ABI - Fluxo de nêutrons térmicos, t=3s.

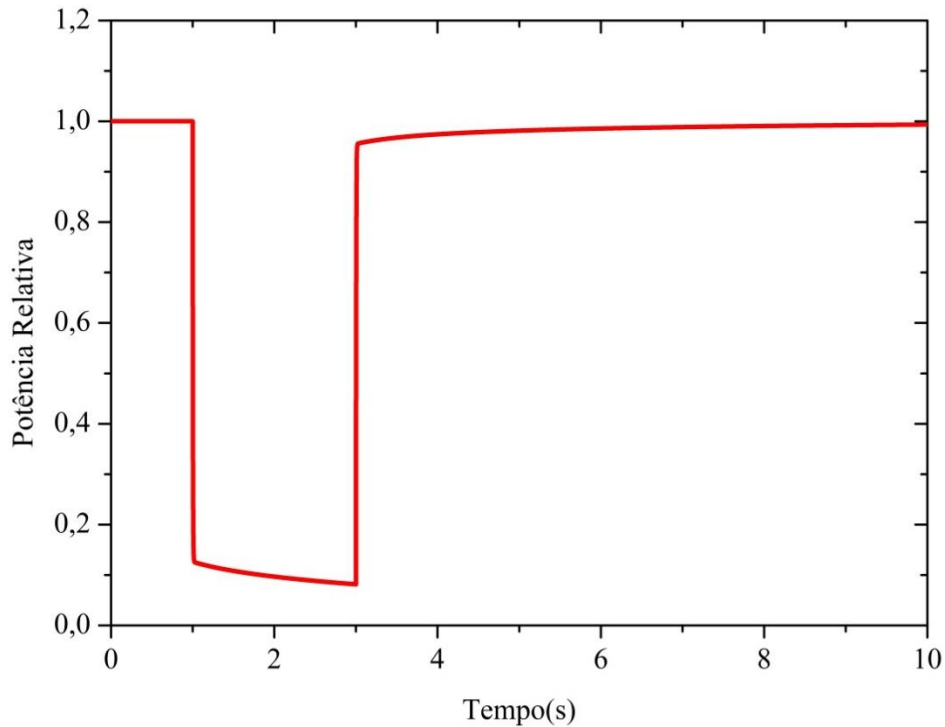


Figura 29 - ABI - Variação da potência relativa.

Com a interrupção do feixe de prótons no instante em 1 s, observa-se uma mudança abrupta na potência, com uma redução de 87% em 0,025s, e também ocorre uma mudança abrupta no nível de potência em 3s. Além disso, observa-se que entre esses instantes a potência é reduzida lentamente em 35% devido à subcriticalidade do reator do sistema ADS, no entanto, essa redução ocorre de forma um pouco mais acentuada quando se compara com o Caso 1. Essa diferença se dá, provavelmente, devido as diferentes composições dos núcleos, pois no Caso 2 existe o refletor.

5.2.2.2 Sobre Potência do feixe do acelerador (ABO)

Neste transiente, o reator está operando criticamente e a intensidade do feixe de prótons do acelerador é aumentada em 100% instantaneamente e após 2 s o feixe tem a sua intensidade restaurada ao nível inicial. A Figura 30 e a Figura 31 mostram os fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no instante em 3 s, no final do ABO, obtidos no plano de número 25 próximo ao centro do reator. O comportamento

da potência relativa no transiente ABO, considerando uma simulação com duração de 10 s, pode ser verificado na Figura 32.

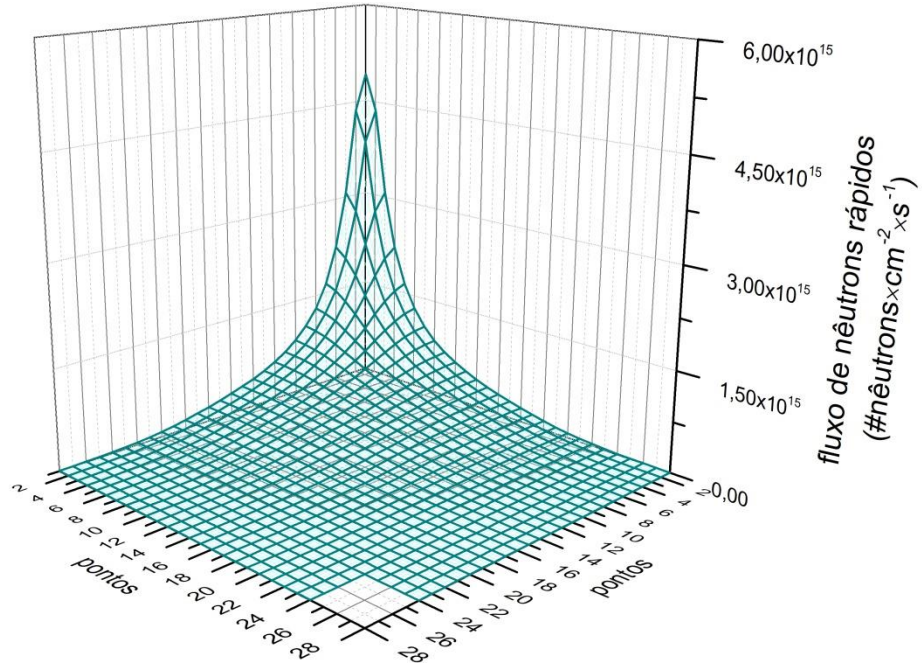


Figura 30 - ABO - Fluxo de n\u00e9utrons r\u00e1pidos, t=3s.

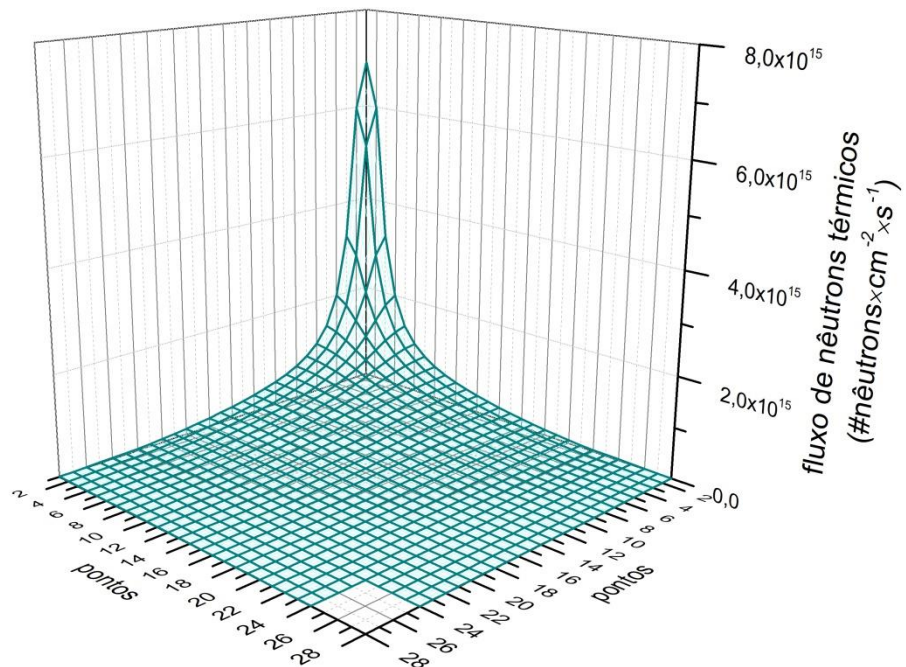


Figura 31 - ABO - Fluxo de n\u00e9utrons t\u00e9rmicos, t=3s.

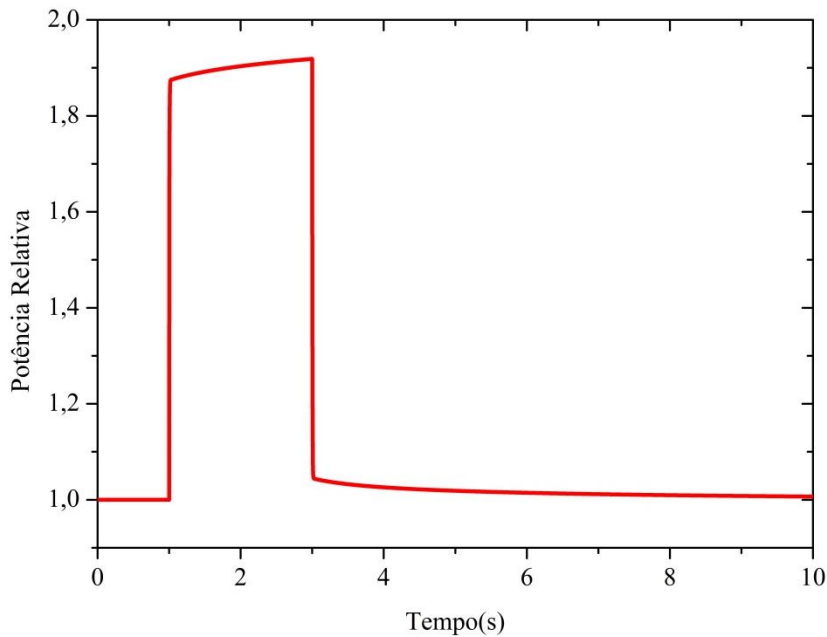


Figura 32 - ABO - Variação da potência relativa.

Com o aumento da intensidade do feixe de prótons do acelerador no instante em 1 s, uma variação instantânea da potência relativa é observada, com um aumento de 87,5% em um intervalo de 0,025s. Com o acelerador operando em intensidade normal, o reator ADS opera em criticalidade e, portanto, com um aumento na intensidade do feixe, o reator começa a operar “supercrítico”. Assim, pode-se observar um aumento gradual em 2,35% da potência entre os instantes 1 e 3 s. Assim como no ABI, essa variação é um pouco mais acentuada quando se compara com o Caso 1. Essa diferença se dá, provavelmente, devido as diferentes composições dos núcleos, pois no Caso 2 existe o refletor.

Os resultados do ABI e ABO do Caso 2 apresentam comportamento semelhante ao observado no Caso 1, assim como nas já citadas simulações em uma dimensão (Slab), [3] e [27], e em duas dimensões, [4] e [26].

CAPÍTULO 6 – CONCLUSÃO

Nos capítulos iniciais deste trabalho são apresentados e discutidos os principais conceitos sobre os sistemas do reator ADS, o combustível usado e o impacto na sociedade proporcionado pela utilização desse tipo especial de reatores são discutidos. Alguns dos transientes mais comuns são brevemente analisados também nessa seção.

Em seguida, as equações da cinética espacial da difusão de nêutrons em três dimensões com fonte externa de nêutrons são deduzidas para serem modelados numericamente a partir das equações de transporte de Boltzmann. A discretização no espaço da equação da cinética espacial foi feita pelo método das diferenças finitas de malha fina com esquema centrado, a dependência no tempo foi resolvido pelo método implícito de Euler e a equação dos precursores de nêutrons atrasados foi integrada analiticamente no tempo. Essas equações finais foram implementadas no código computacional desenvolvido no IEN em FORTRAN para as simulações.

Nos resultados, são simuladas três diferentes cenários. A primeira simulação é para validar o código, onde foi utilizado o mesmo modelo de reator de um problema de referência com a literatura, o mesmo transiente da referência foi simulado. Os valores obtidos da simulação para validação são comparados com os valores exatos da solução analítica do problema original. As outras duas simulações são casos de reatores ADS, no primeiro caso, um reator cúbico homogêneo sem refletor com fonte externa de nêutrons, para dois grupos de energia de nêutrons e um grupo de precursores de nêutrons atrasados. No segundo caso, também de um reator ADS, porém, um exemplo mais realista de um reator PWR modificado com fonte externa de nêutrons e com refletor, para dois grupos de energia de nêutrons e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. Para os dois casos foram simulados condições de mau funcionamento do acelerador de prótons relacionados com a intensidade do feixe e o transiente do perfil do fluxo de nêutrons foi apresentado e analisado para a interrupção do feixe e para a sobre potência do feixe de prótons.

Embora existam poucas publicações e estudos na literatura para serem utilizados como comparação de referência com os resultados obtidos neste trabalho, que também utilizem a cinética espacial, os resultados são compatíveis com estudos similares em uma e em duas dimensões.

A análise gráfica para os transientes dos perfis de distribuição dos nêutrons dentro do núcleo subcrítico dos reatores ADS simulados nesse trabalho, ligados com a intensidade do feixe de prótons, mostram uma resposta muito rápida para qualquer estímulo do acelerador e que os problemas relacionados com o acelerador de prótons podem ser rapidamente contornados com a normalização do sistema. Desse modo sugere-se a utilização de um acelerador reserva para pronta ação caso haja uma repentina interrupção do feixe de prótons. Surge também a necessidade do monitoramento de todos os subsistemas do reator ADS, ou de pelo menos o subsistema do acelerador, caso haja uma sobre potência, basta que o sistema de supervisão acione o sistema de proteção e controle que atuará no processo de desligamento do reator.

Prosseguindo e aprimorando este trabalho, para pesquisas futuras sugere-se simulações mais completas, utilizando a abordagem da cinética espacial, e que incluam também a análise de parâmetros térmicos e hidráulicos através da implementação de um modelo com realimentação termo hidráulica no código computacional. Também é proposto que o código desenvolvido fosse aperfeiçoado para simular uma geometria real dos atuais ADS, que são constituídos de elementos combustíveis hexagonais.

CAPÍTULO 7 – REFERÊNCIAS

- [1] IPCC, AR5 Synthesis Report: Climate Change (2014).
- [2] C. Rubbia, et al. "Conceptual Design of a Fast Neutron Operated High Power Energy Amplifier", CERN Report, CERN/AT/95-44 (ET), Genebra (1995).
- [3] W. V. de Abreu, Análise Numérica de Transientes em um Reator Slab Guiado por Fonte Externa, Dissertação de Mestrado, IEN-CNEN, Rio de Janeiro, Brazil (2017).
- [4] FIQUEIRA, A. J., Cinética Espacial para Modelar Transientes em Reatores ADS, Tese de Doutorado, PEN-COPPE-UFRJ, Rio de Janeiro, Brazil (2015).
- [5] GAO Nuclear Fuel Cycle Options. Technical Report GAO-12-70, United States Government Accountability Office (2011).
- [6] Institute of Physics, Accelerator Driven Subcritical Reactors, H. NIFENECKER, O. MEPLAN e S. DAVID.
- [7] Accelerator-driven sub-critical reactor system (ADS) for nuclear energy generation, S. S. KAPOOR.
- [8] Accelerator-driven Systems (ADS) and Fast Reactors (FR) in Advanced Nuclear Fuel Cycles – A Comparative Study, OECD Nuclear Energy Agency (2002), available on the NEA webpage on Accelerator-driven Systems (ADS) and Fast Reactors (FR) in Advanced Nuclear Fuel Cycles.
- [9] Spallation Physics - An Overview, G. J. Russell, 1CANS-XI International Collaboration on Advanced Neutron Sources KEK. Tsukuba. (1990).
- [10] Spallation Reaction Physics. Manuscript for the Lecture "Neutron Sources for ADS" for Students of the Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering at Czech Technical University, Krása, A., Prague (2010).
- [11] G.S. Bauer, Physics and Technology of Spallation Neutron Sources, Spallation Neutron Source Division.

- [12] MUSIOL, G., RANFT, J., REIF, R., SEELIGER, D., 1998 Kern und Elementarteilchenphysik, Berlin (1988) .
- [13] Annals of Nuclear Energy, From Conventional Nuclear Power Reactors to Accelerator-Driven Systems, Z. YASIN e M. SHAHZAD (2009).
- [14] Plentiful Energy, The Story of the Integral Fast Reactor, C. TILL e Y. CHANG.
- [15] Report to Congress on Advanced Fuel Cycle Initiative: The Future Path for Advanced Spent Fuel Treatment and Transmutation Research. U.S. Department of Energy. Washington, D.C.: U.S. Department of Energy (2003).
- [16] A Technology Roadmap for Generation IV Nuclear Energy Systems, NERAC e GIF (2002).
- [17] Inherent Safety of Fuels for Accelerator-Driven Systems, M. Eriksson, J. Wallenius, M. Jolkkonen & J. E. Cahalan (2005).
- [18] J-PARK: Japan Proton Accelerator Research Complex, KEK/JAEA J-PARK Center (2011), High Energy Accelerator Research Organization(KEK), Japan Atomic Energy Agency(JAEA).
- [19] MYRRHA: A Multipurpose Accelerator Driven System for Research & Development, H. A. Abderrahima, P. Kupschus, E. Malambu, P. Benoit, K. V. Tichelen, B. Arien, F. Vermeersch, P. D'hondt, Y. Jongen, S. Ternier, D. Vandeplassche (2001).
- [20] Nuclear Reactor Physics 2ed, 2007, WESTON. M. STACEY.
- [21] Diffusion Theory Methods for Spatial Kinetics Calculations. Progress in Nuclear Energy, 1996, SUTTON, T. M.; AVILES, B. N.
- [22] S. Nakamura, Computational Methods in Engineering and Science, Wiley and Sons, New York, USA (1977).
- [23] Zelmo R. Lima, Aplicação do Método dos Pseudo-Harmônicos à Cinética Multidimensional (2005).

- [24] A.C.M. Alvim, Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear, 1th Edition, Certa Ltd., Curitiba, Brazil (2007).
- [25] D. R. Ferguson & K. F. Hansen, "Solution of the Space-Dependent Reactor Kinetics Equations in Three Dimensions", Nuclear Science and Engineering (1973).
- [26] A.J. Figueira, A.C.M. Alvim and F.C. da Silva, "Non Symmetric Alternating Direction Explicit Method Applied to the Calculation of ADS Transients", Annals of Nuclear Energy (2016).
- [27] W. V. de Abreu, A. C. Gonçalves, Z. R. de Lima, "Numerical Analysis for Transients in External Source Driven Reactors", World Journal of Nuclear Science and Technology (2017).
- [28] Langenbuch, Maurer e Werner (LMW) (LANGENBUCH et al., 1977a).