

UMA COMBINAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS DIFERENCIAL E DA TEORIA DE PERTURBAÇÃO PARA O CÁLCULO DOS COEFICIENTES DE SENSIBILIDADE

Adimir dos Santos* e A. A. Borges**,

(*) Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN
Caixa Postal 11049
05508-900 São Paulo, SP

(**) Instituto de Estudos Avançados, CTA / IEAv
Caixa Postal 6044
12231-970 São José dos Campos, SP

RESUMO

Desenvolve-se aqui um novo método para calcular coeficientes de sensibilidade. Este novo método é uma combinação das duas metodologias tradicionais usadas para calcular estes coeficientes, o método diferencial e o método da teoria da perturbação generalizada. O método aqui apresentado consiste em fazer como parâmetro integral o fluxo médio em uma região arbitrária do sistema pois dessa forma, o coeficiente de sensibilidade passa a conter somente o termo correspondente ao fluxo de nêutrons. Para obtenção deste novo coeficiente, obtém-se fluxo real e o fluxo adjunto generalizado para um parâmetro integral genérico através do método de perturbação e são obtidas as derivativas funcionais do parâmetro integral com relação a seção de choque e ao fluxo, utilizando o método diferencial.

Palavras chave: perfis de sensibilidade, teoria de perturbação, parâmetros integrais.

I. INTRODUÇÃO

Um dos parâmetros fundamentais para se estabelecer a incerteza em parâmetros de desempenho de reatores nucleares devido a incertezas que surgem dos dados nucleares básicos é o coeficiente de sensibilidade [1-3]. É definido como a relação entre a variação de porcentagem do parâmetro de desempenho e a porcentagem de variação do dado nuclear básico. Além de estabelecer uma ligação entre a incerteza dos dados nucleares básicos e a incerteza em parâmetros de desempenho, o coeficiente de sensibilidade possui uma característica matemática importante, pois provê uma medida da importância do dado nuclear básico no cálculo do parâmetro de desempenho em questão. Assim, o dado nuclear mais importante para o cálculo de um parâmetro de desempenho será o que possuir o maior coeficiente de sensibilidade.

Neste trabalho desenvolve-se uma nova metodologia [7] para obter coeficientes de sensibilidade, baseada na combinação de dois métodos tradicionais, o método diferencial e a teoria de perturbação generalizada.

II. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Método Diferencial. No método diferencial o coeficiente de sensibilidade é obtido a partir de uma pequena perturbação num dado nuclear específico \mathbf{s}_k . Considerando o parâmetro integral R como um funcional explícito de \mathbf{s}_k somente para casos estacionários e notando que fluxos e densidades de núclídeos são funcionais implícitos de \mathbf{s}_k através das equações de transporte de nêutrons, tem-se:

$$dR = R[\mathbf{s}_k + d\mathbf{s}_k] - R[\mathbf{s}_k]. \quad (1)$$

Expandindo em uma série funcional de Taylor e desprezando os termos de ordem superiores a 1,

$$\frac{dR}{R} = \int_{\mathbf{x}} \frac{dR}{d\mathbf{s}_k} \frac{d\mathbf{s}_k}{R} d\mathbf{x}. \quad (2)$$

Nenhuma referência é feita nesta aproximação, em relação ao métodos de perturbação ou variação empregado, sendo assim, define-se a função de sensibilidade de modo que ela

possa ser vista exatamente como uma quantidade diferencial.

$$P_{s_k}(\mathbf{x}) = \frac{d \ln R}{d \ln s_k} = \frac{s_k}{R} \frac{dR}{ds_k} \quad (3)$$

O método para se obter o coeficiente de sensibilidade consiste em diferenciar o parâmetro integral R em relação aos dados nucleares básicos específicos $s_k(\vec{r})$, onde \vec{r} é um ponto pertencente ao espaço das fases \vec{X} . A expressão para o coeficiente de sensibilidade é dada por :

$$S_k = \frac{s'_k}{R} \left[\frac{dR}{ds_{g'}} + \frac{dR}{d\Phi} \frac{d\Phi}{ds_{g'}} \right] \quad (4)$$

As Diferenciais Considerando o parâmetro integral R definido como um funcional explícito das funções $\Phi(\xi)$ e do dado nuclear básico $\sigma(\xi)$ tem-se que:

$$R = \int_x F[\Phi(\vec{x}), s(\vec{x})] d\vec{x} \quad (5)$$

Assim, o problema de análise de sensibilidade, em termos diferenciais, reduz-se a calcular a derivada funcional de R , com relação a uma seção de choque específica $\sigma_{g'}$. Após efetuar a diferencial a equação fica com dois termos. O primeiro termo representa o efeito direto de $\sigma_{g'}$ sobre R . O segundo termo, chamado de efeito indireto envolve a derivada $d\Phi / ds_k$ que deve ser obtida para cada dado nuclear básico σ_k envolvido no cálculo através das equações que regem o fenômeno (equação de transporte ou equação de difusão). A dificuldade do método diferencial reside justamente nesse termo, pois ele deve ser determinado para cada um dos dados nucleares básicos envolvidos no problema. Considerando a derivada funcional de R em relação a Φ , e se \vec{r} pertence ao espaço \vec{X} , a diferencial de R em relação ao fluxo $\Phi(\vec{r})$ dá a própria diferencial de F em relação ao fluxo $\Phi(\vec{r})$, se \vec{r} não pertence ao espaço \vec{X} esta derivada é zero. Como S_k é dado pela equação (4), após manipulações algébricas pode-se escrever a equação para S_k , como:

$$S_k = \frac{s_k}{R} \left[\frac{\int F(\Phi, s)}{\int s} + \int_x \frac{\int F}{\int \Phi(\vec{x})} \frac{d\Phi(\vec{x})}{ds(\vec{r})} d\vec{x} \right] \quad (6)$$

desde que F é um funcional explícito de σ_k e de Φ , as diferenciais $\partial F / \partial \sigma_k$ e $\partial F / \partial \Phi$ são funções analíticas obtidas diretamente. Para se obter S_k , torna-se necessário a diferencial $\partial \Phi / \partial \sigma_k$. Na prática, ρ define uma região do sistema onde $\sigma_{g'}$ é constante. Na equação (6), o primeiro

termo dentro do colchete, representa o termo de efeito direto para o cálculo dos coeficientes de sensibilidade e a obtenção de S_k reduz-se à derivação de $d\Phi / ds_{g'}$, uma vez que R é um funcional explícito de Φ .

Método Adjunto Para calcular o coeficiente de sensibilidade via teoria de perturbação generalizada [4], os fluxos direto e adjunto, $\Phi(\xi)$ e $\Phi^*(\xi)$, devem ser calculados a partir das equações direta e adjunta de transporte

$$(A - IB)\Phi \equiv L\Phi \equiv 0 \quad (7)$$

$$(A^* - IB^*)\Phi^* \equiv L^*\Phi^* \equiv 0 \quad (8)$$

onde A e A^* são operadores de fugas, reais e adjuntas, B e B^* são os operadores de fissão real e adjunto, e λ o autovalor do sistema. Considerando o parâmetro integral R como a razão homogênea bilinear dada por

$$R = \frac{\int \Phi^* H_1 \Phi d\vec{x}}{\int \Phi^* H_2 \Phi d\vec{x}} \quad (9)$$

onde, H_1 e H_2 são operadores de fluxos adequados que dependem da seção de choque, $\sigma(\vec{X})$, \vec{X} e $d\vec{X}$ são os vetores posição e elemento de volume diferencial no espaço das fases, o coeficiente de sensibilidade para a teoria de perturbação generalizada também é escrita na forma,

$$S_R = s(\vec{r}) \left[\frac{\int \Phi^* \frac{dH_1}{ds} \Phi d\vec{x}}{\int \Phi^* H_1 \Phi d\vec{x}} - \frac{\int \Phi^* \frac{dH_2}{ds} \Phi d\vec{x}}{\int \Phi^* H_2 \Phi d\vec{x}} \right] + \quad (10)$$

$$\frac{s(\vec{r})}{R} \left[\int \frac{\int R}{\int \Phi} \frac{d\Phi}{ds(\vec{r})} d\vec{x} + \int \frac{\int R}{\int \Phi^*} \frac{d\Phi^*}{ds(\vec{r})} d\vec{x} \right]$$

Cada uma das diferenciais acima, é uma diferencial funcional, caracterizando as taxa de variação de alguma variável com relação a outra por unidade de volume, no espaço de fases.

Condição de Igualdade dos Métodos Conhecendo as equações para o fluxo direto e para o fluxo adjunto, dadas pelas equações (7) e (8), e um parâmetro integral R dado pela equação (9) como função de Φ , Φ^* e $\sigma_{g'}$. A função de sensibilidade é dada pela equação (10) onde Γ_g e Γ_g^* são soluções das seguintes equações:

$$L^* \Gamma^* = \frac{\int R}{\int \Phi_g} \quad (11)$$

$$L \Gamma_g = \frac{\int R}{\int \Phi_g}. \quad (12)$$

Comparando o efeito indireto do método diferencial com o efeito indireto, ou efeito de fluxo, do método adjunto tem-se claramente que:

$$\left\langle \frac{\int R}{\int \Phi_g} \frac{d\Phi_g}{d\mathbf{s}_{g'}} \right\rangle = \int \Gamma_{gg'}^* \frac{dL}{d\mathbf{s}_{g'}} \Phi_g dV \quad (13)$$

Estes resultados são idênticos àqueles derivados usando o método GPT e o método variacional. Nota-se que para o modelos simples das componentes de Φ_g como uma função de $\sigma_{g'}$ para aproximações analíticas para solução da equação de Boltzmann, com a aproximação diferencial é possível avaliar funções de sensibilidade pela diferença funcional direta. As definições da equação para R , os efeitos diretos, fluxos, e adjunto podem ser calculados usando a equação (13). Estas equações permitem obter os fluxos \mathbf{G}_g e \mathbf{G}_g^* . Neste caso, o parâmetro integral R é o próprio fluxo Φ_g .

Combinação Entre os Dois Métodos A partir da equação para os perfis de sensibilidade, onde o parâmetro S_R é dado por,

$$S_R = \frac{dR/R}{d\mathbf{v}/\mathbf{s}} \quad (14)$$

será considerado um parâmetro integral R , independente de Φ^* . Conforme o exposto, a dificuldade do método diferencial consiste na determinação da derivada do fluxo de nêutrons em relação ao dado nuclear básico. Para combinar ambos os métodos tem-se que considerar o parâmetro integral R como sendo somente um funcional do fluxo de nêutrons Φ . Da equação (10) observa-se que somente o terceiro termo sobrevive, pois no quarto termo está se tomando o parâmetro integral como sendo independente do fluxo adjunto, logo não existe o termo diferencial no fluxo adjunto Φ^* e para os dois primeiros termos pode-se ver que $dH_1/d\sigma_{g'}$ e $dH_2/d\sigma_{g'}$ se anulam pois não há dependência de Φ em H_1 e H_2 . Pode-se, portanto, obter o termo $d\Phi/d\sigma_{g'}$ a partir da expressão,

$$\frac{d\Phi}{d\mathbf{s}} = \int \Gamma^* \frac{dL}{d\mathbf{s}} \Phi d\bar{\mathbf{x}} \quad (15)$$

A derivada do fluxo de nêutrons, Φ com relação a $\sigma_{g'}$ é o parâmetro mais difícil de ser calculado pelo método

diferencial. Ele é obtido através do método adjunto resolvendo a equação (15). Uma vez obtido $d\Phi/d\sigma_{g'}$, utiliza-se a equação (6) para a obtenção de S_R . Dessa forma, pode-se combinar o método diferencial e o método adjunto, onde as derivadas parciais de R com relação a σ e Φ são obtidas através do método diferencial visto que R é um funcional explícito de Φ e σ .

A Matriz [A] A partir das equações para Φ_g e também da diferencial $d\Phi_g/d\sigma_{g'}$, define-se a matriz [A], que é a responsável pelos cálculos dos coeficientes de sensibilidade. Esta matriz é a principal dificuldade do método diferencial, devido a sua dependência explícita com os dados nucleares básicos. A função para os coeficientes de sensibilidade na equação (9) pode ser escritas em uma forma matricial:

$$S_R = \frac{\mathbf{S}^{ag}}{R} \{ \bar{D} + \bar{G}[A] \} \quad (16)$$

onde o vetor \bar{D} dá o termo de efeito direto na equação para calcular os coeficientes de sensibilidade. O termos de efeito indireto é dado por dois termos, o vetor \bar{G} e a matriz [A].

Método Adjunto Para calcular o termo de efeito indireto via teoria de perturbação generalizada, os fluxos diretos e adjuntos, $\Phi(\bar{r}, z)$ e $\Gamma^*(\bar{r}, z)$, devem ser calculados a partir das equações (11) e (12). Não serão considerados parâmetros integrais dependentes do fluxo adjunto Φ^* .

Fluxo Adjunto Generalizado Para que se possa calcular o coeficiente de sensibilidade via teoria de perturbação, é necessário se calcular o fluxo adjunto generalizado. Para isto, usa-se a equação diferencial adjunta não homogênea generalizada dada pela equação (11). A solução da equação linear não homogênea adjunta para o fluxo generalizado, de segundo grau, é da forma:

$$\Gamma_g^* = \Gamma_{pg}^* + \Gamma_{hg}^* \quad (17)$$

onde Γ_{pg}^* é a solução particular e Γ_{hg}^* é a solução da equação homogênea.

Solução da Equação Geral Faz-se uma expansão de Γ_{hg}^* numa série dupla em função seno e função de Bessel:

$$\Gamma_{hg}^* = \sum_{m,n} A_{m,n} J_n \left(\frac{\alpha_n r}{R} \right) \text{sen} \left(\frac{m p z}{H} \right) \quad (18)$$

onde α_0 é o primeiro zero da função de Bessel. Demonstra-se imediatamente que Γ_{hg}^* é solução da equação homogênea tendo como condições de contorno,

$$\Gamma_{g g'}^*(R, z) = \Gamma_{g g'}^*(r, H) = 0. \quad (19)$$

Em termos matriciais, a solução mostrada na equação (18) é dada por:

$$[\Gamma_{g g'}^*] = \left[\frac{\int R}{\int \Phi_{g'}} \right]^T [B]^T \Theta_1 \quad (20)$$

onde Θ_1 são constantes.

Efeito Indireto, Método Adjunto No formalismo multigrupo o efeito indireto para cálculo dos coeficientes de sensibilidade é dado por:

$$I_n = \sum_{g'} \int \Gamma_{g'}^* \frac{d L_g}{d s_{g'}} f_g dV \quad (21)$$

onde o fluxo adjunto generalizado $\Gamma_{g g'}^*$, é dado pela equação (17) e o fluxo real $\Phi_{g'}$ é dado pela equação (7). Portanto, substituindo os valores encontrados para o fluxo adjunto generalizado e para a diferencial do operador de Boltzmann, e usando o método de transposição de matrizes, obtêm-se a solução para a equação (20). Esta equação pode ser escrita na forma matricial como:

$$I_n = \left[\frac{\int R}{\int \Phi_g} \right]^T [C]^T \Theta_1 \quad (22)$$

onde Θ_1 é a constante definida pela soluções das integrais das equações de Bessel e senos, a matriz [C] é dada por,

$$[C] = [B]^T [D]^T \quad (23)$$

e a matriz [B] é a mesma que aparece na solução de $[\Gamma_{g g'}^*]$.

Parâmetro Integral $R = \hat{\mathbf{v}} \cdot \mathbf{F}_g dV$ Para que se possa calcular o coeficiente de sensibilidade quando $R = \Phi_g$, é necessário calcular o fluxo adjunto generalizado, pois o fluxo direto já foi calculado anteriormente. A equação adjunta associada é dada pela equação (11) e tem a forma,

$$L^* \Gamma^* = \frac{\int R}{\int \Phi_g} = d_{g g'} \quad (24)$$

onde

$$\frac{\int R}{\int \Phi_g} = \begin{cases} 1 & \text{para } g = g' \\ 0 & \text{para } g \neq g' \end{cases} \quad (25)$$

esta equação deve ser resolvida para cada grupo g. Este é um caso particular do exposto para o método adjunto, considerando um parâmetro integral generalizado. No desenvolvimento anterior o parâmetro integral R foi considerado genérico englobando inclusive o caso em que

$R = \int_V \Phi_g dV$. Pode-se de imediato construir a matriz [

$B]_g$, solução da equação (20), propondo R como:

$$R = \int_V \Phi_1 dV + \dots + \int_V \Phi_G dV \quad (26)$$

nesse caso tem-se:

$$\begin{cases} \frac{\int R}{\int \Phi_1} = 1 \\ \vdots \\ \frac{\int R}{\int \Phi_G} = 1 \end{cases} \quad (27)$$

ou seja, a fonte é unitária e pode-se demonstrar que a matriz $[B]_g$ é a soma de $[B]_1 + \dots + [B]_G$ e conseqüentemente os coeficientes de sensibilidade são iguais entre os três métodos. Portanto, o proposto da combinação entre os dois métodos resume-se em assumir

$R = \int_V \Phi_g dV$. A matriz [A], que envolve a derivativa

do fluxo Φ_g em relação a $\sigma_{g'}$ pode ser obtida imediatamente pela igualdade entre os métodos. Dessa forma obtêm-se a solução da equação (15) assumindo $R = \int_V \Phi_g dV$ com o

método adjunto e a partir disso obtêm-se a matriz [A]. Uma vez obtida a matriz [A] pode-se utiliza-la para qualquer tipo de parâmetro integral ou seja:

$$S_R = \frac{S_{g'}}{R} [\bar{D} + \bar{G}[A]] \quad (28)$$

conforme anteriormente.

III. CONCLUSÕES

O método utilizado e as aproximações envolvidas nos cálculos para formulação do método de sensibilidade adjunto feitos neste trabalho procura explicitar ao máximo as hipóteses simplificadoras adotadas, no sentido fornecer resultados idênticos para o problema de perfis de sensibilidade. Este trabalho, mostra um novo método para calcular os coeficientes de sensibilidade, um método mais prático e mais ágil em termos de cálculos do que os

métodos tradicionalmente usados para fazer este tipo de cálculo. Sua construção é feita, combinando os métodos diferencial e o método da teoria de perturbação generalizada. A idéia de construir este novo método teve sua consistência firmada, devido as dificuldades criadas para se calcular perfis de sensibilidade, em termos de manuseio matemáticos, por estes dois métodos citados acima. O método diferencial, calcula os coeficientes de sensibilidade diferenciando diretamente o parâmetro integral R e as equações que regem o problema, tendo a vantagem de não depender do parâmetro integral, ou seja, as derivadas funcionais do fluxo de nêutrons com relação ao dado nuclear básico podem ser usadas para qualquer tipo de parâmetro integral, porém possui a desvantagem de depender do dado nuclear básico, ou seja, as derivadas do fluxo de nêutrons devem ser feitas para cada um dos dados nucleares básicos envolvidos no cálculo dos coeficientes de sensibilidade para o problema. Estes comportamentos do método diferencial são discutidos e mostrados nas deduções que foram feitas para as equações que compõem este método, como feitas por Oblow [5], e reconstituídas neste trabalho um pouco mais elaboradas. O método via teoria da perturbação generalizada, calcula os coeficiente de sensibilidade diretamente das equações que regem o problema, neste caso foi utilizada a equação de difusão de nêutrons, via um processo de linearização e com o auxílio das funções adjuntas. Este método possui a vantagem de ser independente do dado nuclear básico, porem possui a desvantagem de depender do parâmetros integral. Assim, as equações adjuntas devem ser resolvidas para cada um dos parâmetros integrais. Este comportamento do método da teoria da perturbação generalizada, também é mostrado com as deduções que foram feitas para as equações que compõem este método, como feitas por Gandini [2], e reconstituídas neste trabalho um pouco mais elaboradas. Neste trabalho, o que foi desenvolvido é a combinação dos dois métodos descritos acima, ou seja, método diferencial e método da teoria da perturbação generalizada, respectivamente. Esta combinação dos dois métodos citados acima é feita para que se possa eliminar a dependência tanto dos dados nucleares básicos quanto dos parâmetros integrais, no novo método a ser desenvolvido, conseguindo eliminar tais dependências o problema da dificuldade dos cálculos é sanado e tem-se um método mais prático e mais ágil que se quer. Esta nova técnica de cálculos dos perfis de sensibilidade foi idealizada com o propósito de implementa-la no código JULIET [4,6] que calcula os perfis de sensibilidade pelos dois métodos anteriores. Como estes cálculos são geralmente longos, em tempo, propos-se esta nova técnica de cálculo para agilizar mais este longo tempo, e por conseguinte, também agilizar os cálculos pelo código JULIET.

REFERÊNCIAS

[1] Usachev, L. N., **Perturbation Theory for the Breeding Ratio and for other Number Ratios Pertaining to Various**

Reactor Processes, J. Nucl. Energy, Parts A/B, 18 , 571 1964.

[2] Gandini, A. J., **A Generalized Perturbation Method for Bilinear Functional of the Real and Adjoint Neutron Fluxes**, Nucl. Energy, 21, 755 ,1967.

[3] Stacey,Jr, W. M., **Variational Estimates and Generalized Perturbation Theory for the Ratios of Linear and Bilinear Functionals**,J. Math. Physics, 133, 1119 ,1972.

[4] Greenspan, E., **New Development in sensitivity Theory, in Advances in Nuclear Science and Technology**, Acadmic Press, vol. 14, 1982.

[5] Oblow, E. M., **Sensitivity Theory from a Differential Viewpoint**, Nucl. Sci. Eng., 59, 187, 1976.

[6] Lucius, J. L., Weisbin, C. R., Marable, J. H., Drischler, J. D., Wright ,R. Q., White, J. E., **A User's Manual for the FORSS Sensitivity and Uncertainty Analysis Code System**, ORNL-5316, 1977

[7] Borges, A. A., **Uma Combinação Entre os Métodos Diferencial e da Teoria de Perturbação para o Cálculo dos Coeficientes de Sensibilidade**, Tese de Mestrado, Universidade de São Paulo, IPEN,1998.

ABSTRACT

A new method for the calculation of sensitivity coefficients is developed. The new method is a combination of two methodologies used for calculating these coefficients, which are the differential and the generalized perturbation theory methods. The proposed method utilizes as integral parameter the average flux in an arbitrary region of the system. Thus, the sensitivity coefficient contains only the component corresponding to the neutron flux. To obtain the new sensitivity coefficient, the derivatives of the integral parameter, $\Phi(\xi)$, with respect to σ are calculated using the perturbation method and the functional derivatives of this generic integral parameter with respect to σ and Φ are calculated using the differential method. The new method merges the advantages of the differential and generalized perturbation theory methods and eliminates their disadvantages.