



Universidade Federal
do Rio de Janeiro

Escola Politécnica

APROXIMAÇÃO ALTERNATIVA PARA AS EQUAÇÕES DA CINÉTICA DE NÊUTRONS MODIFICADA

Rodrigo Costa Diniz

Projeto de Graduação apresentado ao Curso de Engenharia Nuclear da Escola Politécnica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Engenheiro.

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves

Felipe Siqueira de Souza da Rosa

Rio de Janeiro

Fevereiro de 2017

APROXIMAÇÃO ALTERNATIVA PARA AS EQUAÇÕES DA
CINÉTICA DE NÊUTRONS MODIFICADA

Rodrigo Costa Diniz

PROJETO DE GRADUAÇÃO SUBMETIDO AO CORPO DOCENTE DO
CURSO DE ENGENHARIA NUCLEAR DA ESCOLA POLITÉCNICA
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE
DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE
ENGENHEIRO NUCLEAR.

Examinado por:

Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves (UFRJ), D. Sc.

Prof. Felipe Siqueira de Souza da Rosa (UFRJ), D. Sc.

Dr. Daniel Artur Pinheiro Palma (CNEN), D. Sc.

Prof. Aquilino Senra Martinez (UFRJ), D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

FEVEREIRO DE 2017

Diniz, Rodrigo Costa

Aproximação Alternativa para as Equações da Cinética de Nêutrons Modificada / Rodrigo Costa Diniz - Rio de Janeiro: UFRJ/ ESCOLA POLITÉCNICA, 2017.

IX, 60 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Alessandro da Cruz Gonçalves

Felipe Siqueira de Souza da Rosa

Projeto de Graduação – UFRJ/ POLI/ Engenharia Nuclear, 2017.

Referências Bibliográficas: p. 55-56.

1. Física de Reatores. 2. Cinética Pontual. 3. Cinética Inversa. 4. Cinética Modificada I. Gonçalves, Alessandro da Cruz, *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Curso de Engenharia Nuclear. III. Título

Resumo do Projeto de Graduação apresentado à Escola Politécnica/ UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Engenheiro Nuclear.

APROXIMAÇÃO ALTERNATIVA PARA AS EQUAÇÕES DA CINÉTICA DE NÊUTRONS MODIFICADA

Rodrigo Costa Diniz

Fevereiro/2017

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves

Felipe Siqueira de Souza da Rosa

Curso: Engenharia Nuclear

Este projeto propõe uma aproximação para as equações da cinética pontual modificada propostas por NUNES *et al.* [1], através do ajuste do parâmetro de tempo médio de geração. A principal vantagem da aproximação proposta é de manter as equações resultantes com a mesma forma das equações da cinética pontual clássica, possibilitando que sejam usados os mesmos métodos de solução analíticos e numéricos já desenvolvidos na literatura. Esta aproximação consiste em analisar as ordens de grandeza dos termos das equações da cinética pontual modificada, a fim de se identificar os termos de menor contribuição para a solução, resultando em um ajuste do parâmetro de tempo médio de geração. As soluções do modelo proposto são comparadas com aquelas da cinética pontual modificada para a validação. A influência da aproximação proposta na equação da cinética inversa também é analisada, com o objetivo de mostrar que o modelo sugerido também é válido para a cinética inversa.

Palavras-chave: Cinética Clássica, Cinética Modificada, Ajuste do Parâmetro de Tempo Médio de Geração, Aproximação Alternativa para a Cinética Modificada

Abstract of Undergraduate Project presented to POLI/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Nuclear Engineer.

ALTERNATIVE APPROXIMATION TO THE MODIFIED NEUTRON
KINETICS EQUATIONS

Rodrigo Costa Diniz

Fevereiro/2017

Advisors: Alessandro da Cruz Gonçalves

Felipe Siqueira de Souza da Rosa

Course: Nuclear Engineering

This project proposes an approximation for the modified point kinetics equations proposed by NUNES *et al.* [1], through the adjustment of the mean generation time parameter. The main advantage of the proposed approximation is to keep the resulting equations in the same form as the classic point kinetics equations, allowing the use of the same analytical and numerical solution methods already developed in the literature. This approximation consists of analyzing the terms of the modified point kinetics equations in order to identify the least important ones for the solution, resulting in a adjustment of the mean generation time parameter. The solutions of the proposed model are compared with those of the modified point kinetics for validation. The influence of the proposed approximation on the inverse kinetics equation is also analyzed to show that this model is also valid for inverse kinetics.

Keywords: Classic Point Kinetics, Modified Point Kinetics, Correction of the Mean Generation Time Parameter, Alternative Approximation to the Modified Kinetics

Sumário

1	Introdução	1
2	Equações da Cinética Pontual Modificada	4
2.1	Dedução das Equações da Cinética Pontual Clássica	4
2.2	Comparação Entre as Equações da Cinética Pontual Modificada e Clássica	9
2.3	Interpretação Física dos Parâmetros Cinéticos	10
3	Aproximações para as Equações da Cinética Pontual Modificada	13
3.1	Análise da Ordem de Grandeza dos Termos das Equações da Cinética Pontual Modificada	13
3.2	Equações da Cinética Pontual Corrigida	15
3.3	Condições de Validade das Equações da Cinética Pontual Modificada e Corrigida	16
4	Soluções de Alguns Casos das Equações da Cinética Pontual Modificada e Corrigida	18
4.1	Reatividade Constante: Solução Analítica para 1 Grupo de Precursores	18
4.1.1	Cinética Clássica	18
4.1.2	Cinética Corrigida	20
4.1.3	Cinética Modificada	21
4.2	Método de Diferenças Finitas	26
4.3	Reatividade Linear: Solução por Diferenças Finitas para 1 Grupo de Precursores	28
4.3.1	Cinética Clássica	28
4.3.2	Cinética Corrigida	28
4.3.3	Cinética Modificada	28

4.4	Reatividade Linear: Solução por Diferenças Finitas para 6 Grupos de Precusores	29
4.4.1	Cinética Clássica	29
4.4.2	Cinética Corrigida	30
4.4.3	Cinética Modificada	31
5	Equações da Cinética Pontual Corrigida no Cálculo da Reatividade:	
	Cinética Inversa	33
5.1	Cinética Inversa pelas Equações da Cinética Pontual Clássica	33
5.2	Cinética Inversa pelas Equações da Cinética Pontual Modificada . . .	34
5.3	Cinética Inversa pelas Equações da Cinética Pontual Corrigida	35
5.4	Soluções Analíticas da Equação da Cinética Inversa	36
5.4.1	Histórico de Potência Exponencial: $n(t) = n_0 e^{\omega t}$	36
5.4.2	Histórico de Potência Linear: $n(t) = n_0 + \alpha t$	37
6	Resultados	38
6.1	Validação do Método de Diferenças Finitas	39
6.1.1	Cinética Clássica	39
6.1.2	Cinética Corrigida	40
6.1.3	Cinética Modificada	40
6.2	Resultados para Reatividade Constante com 1 Grupo de Precusores	41
6.3	Resultados para Reatividade Constante com 6 Grupos de Precusores	44
6.4	Resultados para Reatividade Linear com 1 Grupo de Precusores . . .	46
6.5	Resultados para Reatividade Linear com 6 Grupos de Precusores . .	47
6.6	Resultados para a Cinética Inversa	49
6.6.1	Histórico de Potência Exponencial	50
6.6.2	Histórico de Potência Linear	51
7	Conclusões	53
	Referências Bibliográficas	55
A	Desenvolvimento da Equação (2.22) do Capítulo 2	57

Lista de Figuras

6.1	Solução para cada modelo para reatividade constante com 1 grupo de precursores, com $\rho_0 = 0.001$ e $\tau = 10^{-3}s$	42
6.2	Varição do erro relativo ao longo do tempo para reatividade constante com 1 grupo de precursores	43
6.3	Solução para cada modelo para reatividade constante com 6 grupos de precursores, com $\rho_0 = 0.001$ e $\tau = 10^{-3}s$	44
6.4	Varição do erro relativo ao longo do tempo para reatividade constante com 6 grupos de precursores	45
6.5	Solução dos diferentes modelos para reatividade linear com 1 grupo de precursores, com $\rho_0 = 0$, $\tau = 10^{-3}s$ e $\alpha = 3.0 \times 10^{-5}s^{-1}$	46
6.6	Varição do erro relativo ao longo do tempo para reatividade linear com 1 grupo de precursores	47
6.7	Solução dos diferentes modelos para reatividade linear com 6 grupos de precursores, com $\rho_0 = 0$, $\tau = 10^{-3}s$ e $\alpha = 3.0 \times 10^{-5}s^{-1}$	48
6.8	Varição do erro relativo ao longo do tempo para reatividade linear com 6 grupos de precursores	49
6.9	Varição do erro relativo ao longo do tempo para histórico de potência exponencial	51
6.10	Varição do erro relativo ao longo do tempo para histórico de potência linear	52

Lista de Tabelas

6.1	Parâmetros para os grupos de precursores do U-235	38
6.2	Parâmetros cinéticos	38
6.3	Erro relativo entre as soluções analítica e numérica	39
6.4	Erro relativo entre as soluções analítica e numérica, com $\rho_0 = 0.006$ e variando Λ	40
6.5	Erro relativo entre as soluções analítica e numérica, com $\rho_0 = 0.006$ e variando τ	40
6.6	Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade constante com 1 grupo de precur- sores, variando ρ e τ , com $0s < t < 100s$	43
6.7	Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade constante com 6 grupos de precur- sores, variando ρ_0 e τ , com $0s < t < 100s$	45
6.8	Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade linear com 1 grupo de precursores, com $\tau = 10^{-3}s$ e variando α , com $0s < t < 100s$	47
6.9	Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade linear com 6 grupos de precursores, com $\tau = 10^{-3}s$ e variando α , com $0s < t < 100s$	48
6.10	Erro relativo máximo entre $\Delta\rho_{mod}(t)$ e $\Delta\rho_{corr}(t)$ para histórico de potência exponencial, com $0s < t < 100s$	50

Capítulo 1

Introdução

O comportamento temporal da população de nêutrons em um reator nuclear é afetado pelas mudanças em sua constituição [2]. O tópico da física de reatores que estuda esse fato é a cinética pontual de reatores, que trata apenas da parte temporal da população de nêutrons, sem a distribuição espacial. Como a potência nuclear é proporcional à população de nêutrons no reator, a importância da cinética pontual é de prever e controlar a potência em diversos transientes, como processos de partida, parada e acidentes.

A distribuição de nêutrons no reator nuclear é regida por equações de conservação e transporte de matéria. Na literatura sobre física de reatores [2], [3], [4], [5], [6], duas equações muito importantes e utilizadas são a equação de transporte e a de difusão de nêutrons, sendo essa última podendo ser obtida a partir de aproximações sobre primeira. A equação de transporte fornece uma descrição mais exata dos nêutrons no núcleo do reator, possuindo, entretanto, a desvantagem de ser uma equação complexa de ser resolvida, tanto analítica quanto numericamente.

A equação de difusão, por ser obtida realizando-se aproximações na equação de transporte, não é exata, mas em diversos casos de interesse descreve satisfatoriamente a distribuição de nêutrons, além de ser consideravelmente mais simples de ser resolvida. Uma das aproximações mais famosa e utilizada é a Lei de Fick, que, como será visto mais a frente, é o ponto de partida para o desenvolvimento de diferentes modelos da cinética clássica usual.

A cinética pontual de nêutrons pode ser obtida tanto pela equação de transporte quanto pela de difusão [2], [7], [8], [9], levando a um sistema de equações com a mesma forma, sendo diferentes apenas pela definição dos parâmetros cinéticos.

Quando não é utilizada a Lei de Fick, as equações da cinética pontual obtidas são ligeiramente diferentes do modelo clássico, dando origem a modelos distintos.

Uma das aplicações da cinética pontual é no cálculo da variação de reatividade necessária para produzir um desejado comportamento temporal da população de nêutrons, que, como é proporcional à potência, produz um determinado perfil de potência nuclear. Esse tópico é chamado de cinética inversa [2].

A cinética pontual modificada [1], [10] é um modelo que consiste, essencialmente, em não desprezar a derivada temporal da densidade de corrente de nêutrons nas equações que dão origem à equação de difusão. Um outro modelo de cinética pontual, a cinética fracionária, proposta por ESPINOSA-PAREDES *et al* [11], não só não despreza esse termo, como ainda utiliza derivada de ordem não inteira (derivada fracionária) na derivada temporal da densidade de corrente de nêutrons, baseando-se na teoria de difusão anômala.

Nesses modelos de cinética propostos, ao não se realizar a aproximação da Lei de Fick, as equações da cinética pontual passam a ter alguns termos a mais, bem como parâmetros que não eram utilizados na cinética clássica, tornando a solução dessas equações mais complexa. No entanto, no caso da cinética modificada, é possível desprezar-se alguns dos termos adicionais, por não influenciarem significativamente no resultado, e simplificar a solução.

Neste projeto será analisado cada termo da equação da cinética pontual modificada, para serem desprezados os de menor influência na solução. O resultado disso é o modelo proposto chamado de cinética pontual corrigida, que consiste basicamente em corrigir um parâmetro cinético, o tempo médio de geração de nêutrons. Com isso, o sistema de equações resultante possui a mesma forma ao da cinética clássica, com apenas um parâmetro alterado por uma constante. Também serão propostos métodos de solução analíticos e numéricos mais simples e/ou eficientes para todos os modelos estudados

No capítulo 2, as equações da cinética pontual modificada são obtidas a partir da equação de transporte, sendo a cinética clássica obtida pela modificada ao se realizar uma aproximação equivalente à Lei de Fick. Neste capítulo também será dado uma interpretação física de cada parâmetro.

No capítulo 3 será analisado a ordem de grandeza de cada termo das equações

da cinética modificada, a fim de se identificar os de menores magnitudes para serem desprezados. Com isso, chega-se ao modelo proposto neste projeto: a cinética pontual corrigida. No final do capítulo, serão estudadas as condições de validade tanto para esse modelo quanto para a cinética modificada.

No capítulo 4 serão considerados alguns problemas comuns de cinética pontual de nêutrons e resolvidos por métodos analíticos ou numéricos. O método numérico a ser utilizado é o de diferenças finitas [12], [13], que, apesar de ser um método simples, produz resultados precisos e eficientes em relação ao tempo computacional requerido.

No capítulo 5, a equação da cinética inversa é obtida para cada modelo de cinética (clássica, modificada e corrigida) e, para compará-los, serão considerados dois casos comuns de problemas de cinética inversa. Os métodos são comparados pela diferença entre a reatividade de cada um deles e a reatividade da cinética clássica [14].

No capítulo 6 serão apresentados os resultados obtidos utilizando-se os métodos de solução dos capítulos 4 e 5. Os resultados são apresentados principalmente em forma de tabelas pois, como será visto, há uma diferença muito pequena entre as soluções da cinética modificada e corrigida, dificultando sua visualização em um gráfico.

No capítulo 7 será discutido a interpretação dos resultados, bem como um resumo do que foi feito e a comparação dos métodos de solução utilizados neste projeto e na literatura.

Por fim, o apêndice A mostra o desenvolvimento detalhado de uma das equações que aparecem no capítulo 2, para evitar um desenvolvimento matemático exaustivo no texto principal.

Capítulo 2

Equações da Cinética Pontual Modificada

2.1 Dedução das Equações da Cinética Pontual Clássica

A descrição da distribuição de nêutrons em um reator nuclear é usualmente feita pela teoria de transporte de nêutrons. As equações da cinética pontual podem ser obtidas a partir da equação de transporte de nêutrons para o fluxo angular φ , em função da posição \mathbf{r} , da energia E , da direção de movimento $\widehat{\Omega}$ e do tempo t , junto com as equações para as concentrações C_i de cada grupo de precursores [2]:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \varphi}{\partial t} + L' \varphi = F'_p \varphi + \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^6 \left[\lambda_i \chi_i(E) C_i \right] \quad (2.1a)$$

$$\frac{1}{4\pi} \chi_i(E) \frac{\partial C_i}{\partial t} = F'_i \varphi - \frac{1}{4\pi} \lambda_i \chi_i(E) C_i \quad i = 1, \dots, 6 \quad (2.1b)$$

onde:

$$\varphi \equiv \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) \quad (2.2a)$$

$$C_i \equiv C_i(\mathbf{r}, t) \quad (2.2b)$$

e os operadores L' , F'_p e F'_i são:

$$L'(\cdot) \equiv \widehat{\Omega} \cdot \nabla(\cdot) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t)(\cdot) - \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \widehat{\Omega}' \rightarrow \widehat{\Omega}, t)(\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' \quad (2.3a)$$

$$F'_p(\cdot) \equiv \frac{1}{4\pi} (1 - \beta) \chi_f(E) \int_{4\pi} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)(\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' \quad (2.3b)$$

$$F'_i(\cdot) \equiv \frac{1}{4\pi} \beta_i \chi_i(E) \int_{4\pi} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)(\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' \quad (2.3c)$$

onde Σ_t , Σ_s e Σ_f são as seções de choque macroscópica total, de espalhamento e de fissão, respectivamente; χ_f e χ_i são os espectros de energia dos nêutrons gerados por

fissão e por decaimento, respectivamente; ν é o número médio de nêutrons liberados por fissão; β_i e λ_i são a fração de nêutrons atrasados e a constante de decaimento do grupo i de precursores, respectivamente, e β é a fração total de nêutrons atrasados.

Considerando a aproximação P_1 para a seção de choque macroscópica de espalhamento, variação de energia apenas em Σ_{s0} e fluxo angular linearmente anisotrópico [2]:

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \widehat{\Omega}' \rightarrow \widehat{\Omega}, t) \cong \frac{1}{4\pi} \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) + \frac{3}{4\pi} \widehat{\Omega}' \cdot \widehat{\Omega} \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \quad (2.4a)$$

$$\Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \cong \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E', t) \delta(E' - E) \quad (2.4b)$$

$$\varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) \cong \frac{1}{4\pi} \phi(\mathbf{r}, E, t) + \frac{3}{4\pi} \widehat{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) \quad (2.4c)$$

Pelas definições de fluxo escalar de nêutrons e densidade de corrente de nêutrons:

$$\phi \equiv \phi(\mathbf{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) d\widehat{\Omega} \quad (2.5a)$$

$$\mathbf{J} \equiv \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) \widehat{\Omega} d\widehat{\Omega} \quad (2.5b)$$

Pode-se integrar as equações (2.1a) e (2.1b) nos ângulos sólidos para deixá-las em função do fluxo escalar e da corrente de nêutrons:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J} + L\phi = F_p\phi + \sum_{i=1}^6 \left[\lambda_i \chi_i(E) C_i \right] \quad (2.6a)$$

$$\chi_i(E) \frac{\partial C_i}{\partial t} = F_i\phi - \lambda_i \chi_i(E) C_i \quad i = 1, \dots, 6 \quad (2.6b)$$

onde os operadores L , F_p e F_i são:

$$L(\cdot) \equiv \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t)(\cdot) - \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t)(\cdot) dE' \quad (2.7a)$$

$$F_p(\cdot) \equiv (1 - \beta) \chi_f(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)(\cdot) dE' \quad (2.7b)$$

$$F_i(\cdot) \equiv \beta_i \chi_i(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)(\cdot) dE' \quad (2.7c)$$

Para poder eliminar a corrente de nêutrons da equação (2.6a), multiplica-se a equação (2.1a) por $\widehat{\Omega}$ e integra-se nos ângulos sólidos:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \frac{1}{3} \nabla \phi + \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \mathbf{J} = \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E, t) \mathbf{J} \quad (2.8)$$

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t) \mathbf{J} = -\frac{1}{3} \nabla \phi \quad (2.9)$$

$$\frac{3D}{v(E)} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial t} + \mathbf{J} = -D \nabla \phi \quad (2.10)$$

Onde Σ_{tr} é a seção de choque macroscópica de transporte e D é o coeficiente de difusão:

$$\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t) \equiv \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) - \Sigma_{s1}(\mathbf{r}, E, t) \quad (2.11a)$$

$$D \equiv D(\mathbf{r}, E, t) \equiv \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t)} \quad (2.11b)$$

Aplicando o operador divergência ($\nabla \cdot$) na equação (2.10) e desprezando o termo $(3\nabla D/v) \cdot (\partial \mathbf{J}/\partial t)$, pois o coeficiente de difusão varia pouco com a posição, obtém-se:

$$\frac{3D}{v} \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \mathbf{J}) + \nabla \cdot \mathbf{J} = -\nabla \cdot (D \nabla \phi) \quad (2.12)$$

Pela equação (2.6a), o termo $\nabla \cdot \mathbf{J}$ é dado por:

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = [F_p - L]\phi + \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \chi_i C_i) - \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (2.13)$$

sendo $\chi_i \equiv \chi_i(E)$ e $v \equiv v(E)$. Substituindo a equação (2.13) na equação (2.12):

$$\begin{aligned} & \frac{3D}{v} \frac{\partial}{\partial t} \left[(F_p - L)\phi \right] + \frac{3D}{v} \sum_{i=1}^6 \left(\lambda_i \chi_i \frac{\partial C_i}{\partial t} \right) - \frac{3D}{v^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} \\ & + [F_p - L]\phi + \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \chi_i C_i) - \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot (D \nabla \phi) \end{aligned} \quad (2.14)$$

No regime estacionário, as equações (2.14) e (2.6b) se reduzem para:

$$-\nabla \cdot (D_0 \nabla \phi_0) + [L_0 - F_0]\phi_0 = 0 \quad (2.15)$$

onde:

$$D_0 \equiv D(\mathbf{r}, E, t_0) \quad (2.16a)$$

$$\phi_0 \equiv \phi(\mathbf{r}, E, t_0) \quad (2.16b)$$

e os operadores L_0 e F_0 são os operadores L , F_i e F_p no caso estacionário:

$$L_0(\cdot) \equiv \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0)(\cdot) - \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0)(\cdot) dE' \quad (2.17a)$$

$$F_0(\cdot) \equiv \left[(1 - \beta)\chi_f(E) + \sum_{i=1}^6 \beta_i \chi_i(E) \right] \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0)(\cdot) dE' \quad (2.17b)$$

O fluxo adjunto de nêutrons ($\phi^* \equiv \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)$) segue a seguinte equação:

$$-\nabla \cdot (D_0 \nabla \phi^*) + [L_0^+ - F_0^+] \phi^* = 0 \quad (2.18)$$

onde os operadores L_0^+ e F_0^+ são:

$$L_0^+(\cdot) \equiv \Sigma(\mathbf{r}, E, t_0)(\cdot) - \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E \rightarrow E', t_0)(\cdot) dE' \quad (2.19a)$$

$$F_0^+(\cdot) \equiv \nu(E) \Sigma(\mathbf{r}, E, t_0) \int_0^\infty \left[(1 - \beta) \chi_f(E') + \sum_{i=1}^6 (\beta_i \chi_i(E')) \right] (\cdot) dE' \quad (2.19b)$$

Multiplicando a equação (2.18) por ϕ e integrando no volume e na energia:

$$\int_V \int_0^\infty \phi \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi^*) d^3r dE - \int_V \int_0^\infty \phi \left[L_0^+ - F_0^+ \right] \phi^* d^3r dE = 0 \quad (2.20)$$

Multiplicando as equações (2.14) e (2.6b) por ϕ^* e integrando no volume e na energia:

$$\begin{aligned} & \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^* \frac{\partial}{\partial t} \left[(F_p - L) \phi \right] d^3r dE - \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} d^3r dE \\ & + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \sum_{i=1}^6 \left(\lambda_i \phi^* \chi_i \frac{\partial C_i}{\partial t} \right) d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \phi^* \left[F_p - L \right] \phi d^3r dE \\ & + \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \phi^* \chi_i C_i) d^3r dE - \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} d^3r dE \\ & + \int_V \int_0^\infty \phi^* \nabla \cdot (D \nabla \phi) d^3r dE = 0 \end{aligned} \quad (2.21a)$$

$$\int_V \int_0^\infty \chi_i \phi^* \frac{\partial C_i}{\partial t} d^3r dE = \int_V \int_0^\infty \phi^* F_i \phi d^3r dE - \int_V \int_0^\infty \lambda_i \chi_i \phi^* C_i d^3r dE \quad (2.21b)$$

$i = 1, \dots, 6$

Subtraindo a equação (2.21a) da equação (2.20):

$$\begin{aligned} & \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^* \frac{\partial}{\partial t} \left[(L - F_p) \phi \right] d^3r dE \\ & + \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} d^3r dE - \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \sum_{i=1}^6 \left(\lambda_i \phi^* \chi_i \frac{\partial C_i}{\partial t} \right) d^3r dE \\ & - \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \phi^* \chi_i C_i) d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi F_0^+ \phi - \phi^* F_p \phi \right\} d^3r dE \\ & + \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi^* \left[L(\cdot) - \nabla \cdot (D \nabla(\cdot)) \right] \phi - \phi \left[L_0^+(\cdot) - \nabla \cdot (D_0 \nabla(\cdot)) \right] \phi^* \right\} d^3r dE = 0 \end{aligned} \quad (2.22)$$

A equação (2.22) pode ser simplificada para a seguinte equação, sendo o desenvolvimento feito no Apêndice A:

$$\begin{aligned}
& \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^* \frac{\partial}{\partial t} \left[(L - F_p) \phi \right] d^3r dE \\
& + \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} d^3r dE = \int_V \int_0^\infty \phi^* \left[(F - F_0) - (A - A_0) \right] \phi d^3r dE \\
& - \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\phi^* F_i \phi) d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \sum_{i=1}^6 \left[\lambda_i \frac{\partial}{\partial t} (\chi_i \phi^* C_i) \right] d^3r dE \\
& + \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \chi_i \phi^* C_i) d^3r dE
\end{aligned} \tag{2.23}$$

onde:

$$A(\cdot) \equiv L(\cdot) - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t) \nabla(\cdot)) \tag{2.24a}$$

$$A_0(\cdot) \equiv L_0(\cdot) - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla(\cdot)) \tag{2.24b}$$

$$F(\cdot) \equiv F_p(\cdot) + \sum_{i=1}^6 F_i(\cdot) \tag{2.24c}$$

Considerando que a forma espacial do fluxo de nêutrons não varie consideravelmente com o tempo, mantendo o mesmo perfil espacial do regime estacionário, pode-se separar o fluxo em um termo dependente do tempo e um termo dependente da posição e da energia [2], [8], [9]:

$$\phi(\mathbf{r}, E, t) \cong n(t) f(\mathbf{r}, E)$$

Levando isso em conta e desprezando a variação temporal das seções de choque e do coeficiente de difusão na equação (2.23), obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{d^2 n(t)}{dt^2} \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^* f d^3r dE + \frac{dn(t)}{dt} \int_V \int_0^\infty \left[\frac{3D}{v} \phi^* (L - F_p) f + \frac{1}{v} \phi^* f \right] d^3r dE \\
& = n(t) \int_V \int_0^\infty \phi^* \left[(F - F_0) - (A - A_0) \right] f d^3r dE - n(t) \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\phi^* F_i f) d^3r dE \\
& + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \sum_{i=1}^6 \left[\lambda_i \frac{\partial}{\partial t} (\chi_i \phi^* C_i) \right] d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \chi_i \phi^* C_i) d^3r dE
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Multiplicando a equação (2.6b) pelo fluxo adjunto e integrando no volume e na energia:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt} \int_V \int_0^\infty \phi^* \chi_i(E) C_i d^3r dE = n(t) \int_V \int_0^\infty \phi^* F_i \phi d^3r dE \\
& - \lambda_i \int_V \int_0^\infty \phi^* \chi_i(E) C_i d^3r dE \qquad i = 1, \dots, 6
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Define-se o fator de normalização I_f e os seguintes parâmetros cinéticos:

$$I_f \equiv \int_V \int_0^\infty \phi^* F f d^3r dE \quad (2.27a)$$

$$\Lambda \equiv \frac{1}{I_f} \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^* f d^3r dE \quad (2.27b)$$

$$\tau \equiv \frac{1}{\Lambda I_f} \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^* f d^3r dE \quad (2.27c)$$

$$\rho(t) \equiv \frac{1}{I_f} \int_V \int_0^\infty \phi^* \left[(F - F_0) - (A - A_0) \right] f d^3r dE \quad (2.27d)$$

$$\beta_i \equiv \frac{1}{I_f} \int_V \int_0^\infty \phi^* F_i f d^3r dE \quad (2.27e)$$

$$\beta \equiv \sum_{i=1}^6 \beta_i \quad (2.27f)$$

$$\frac{1}{l} \equiv \frac{1 - \beta}{\Lambda} + \frac{1}{\tau \Lambda I_f} \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^* (L - F_p) f d^3r dE \quad (2.27g)$$

$$C_i(t) \equiv \frac{1}{\Lambda I_f} \int_V \int_0^\infty \phi^* \chi_i C_i(\mathbf{r}, t) d^3r dE \quad (2.27h)$$

Com a definição das equações (2.27a) a (2.27h) e dividindo-se as equações (2.25) e (2.26) por ΛI_f , chega-se nas equações da cinética pontual modificada, propostas por NUNES *et al.* [1]:

$$\tau \frac{d^2 n(t)}{dt^2} + \left[1 + \tau \left(\frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right) \right] \frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \left(C_i(t) + \tau \frac{dC_i(t)}{dt} \right) \quad (2.28a)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad i = 1, \dots, 6 \quad (2.28b)$$

2.2 Comparação Entre as Equações da Cinética Pontual Modificada e Clássica

As equações da cinética pontual clássica são obtidas de maneira similar às da cinética modificada obtida na seção 2.1. A diferença fundamental está no tratamento da equação (2.10). Se a seguinte condição for satisfeita:

$$\frac{1}{|\mathbf{J}|} \frac{\partial |\mathbf{J}|}{\partial t} \ll v \Sigma_{tr}, \quad (2.29)$$

pode-se desprezar o termo da derivada temporal da corrente na equação (2.10), e chegar na equação conhecida como Lei de Fick [2]:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) \quad (2.30)$$

Pode-se ver que essa equação é obtida quando o termo $3D/v$ na equação (2.10) tende a 0. Para se obter, então, as equações da cinética clássica a partir da cinética modificada, basta zerar o termo $3D/v$ na equação (2.25) e nas definições dos parâmetros (2.27a) e (2.27g) [1]. Como a definição dos outros parâmetros são idênticas, as equações da cinética pontual clássica são:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (2.31a)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad i = 1, \dots, 6 \quad (2.31b)$$

2.3 Interpretação Física dos Parâmetros Cinéticos

Para interpretar fisicamente os parâmetros cinéticos das equações (2.27b) a (2.27g), torna-se prático considerar o caso de um reator homogêneo e mononegativo. Os operadores para esse caso ficam:

$$L(\cdot) = \Sigma_t(t)(\cdot) - \Sigma_{s0}(t)(\cdot) = \Sigma_a(t)(\cdot) \quad (2.32a)$$

$$Fp(\cdot) = (1 - \beta)\nu\Sigma_f(t)(\cdot) \quad (2.32b)$$

$$Fi(\cdot) = \beta_i\nu\Sigma_f(t)(\cdot) \quad (2.32c)$$

$$F(\cdot) = Fp(\cdot) + \sum_{i=1}^6 Fi(\cdot) = \nu\Sigma_f(t)(\cdot) \quad (2.32d)$$

$$A(\cdot) = L(\cdot) - D(t)\nabla^2(\cdot) \quad (2.32e)$$

e os operadores L_0, F_0 e A_0 são os respectivos operadores avaliados em $t = t_0$. O fator de normalização e os parâmetros cinéticos ficam:

$$I_f = \nu\Sigma_f(t) \int_V \int_0^\infty \phi^* f d^3r dE \quad (2.33a)$$

$$\Lambda = \frac{1}{v\nu\Sigma_f} \quad (2.33b)$$

$$\tau = \frac{3D}{v} = \frac{1}{v\Sigma_{tr}} \quad (2.33c)$$

$$\rho(t) = 1 - \frac{1}{k_{eff}} \quad (2.33d)$$

$$l = \frac{1}{v\Sigma_a} \quad (2.33e)$$

onde:

$$k_{eff} = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_a - DB_g^2} \quad (2.34)$$

A equação (2.34) define o fator de multiplicação efetivo, que é útil para determinar a combinação entre geometria e material que torna o sistema crítico, a partir da seguinte equação:

$$-D\nabla^2\phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a\phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{k_{eff}}\nu\Sigma_f\phi(\mathbf{r}) \quad (2.35)$$

Deixando k_{eff} variar com o tempo, a equação (2.35) reproduz em cada instante de tempo o caso não estacionário, facilitando assim o cálculo do fluxo de nêutrons [8].

Na definição de $\rho(t)$, aparece o termo com o laplaciano da parte espacial do fluxo. Pode-se assumir que a parte espacial obedece ao seguinte problema de valor de contorno [2]:

$$\nabla^2 f(\mathbf{r}) + B_g^2 f(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.36a)$$

$$f(\mathbf{r}_s) = 0 \quad (2.36b)$$

onde \mathbf{r}_s representa a superfície do reator e B_g é chamado de *buckling* geométrico.

A definição (2.27a) para o fator de normalização é útil para que a definição (2.27d) para $\rho(t)$ seja reduzida para (2.33d) no caso homogêneo e monoenergético, levando em consideração que o sistema estava crítico para $t < t_0$. O parâmetro $\rho(t)$ é chamado de reatividade e está relacionado ao desvio do fator de multiplicação da criticalidade ($k_{eff} = 1$) [5], [8].

O parâmetro l é chamado de tempo médio de vida dos nêutrons prontos, estando relacionado com o tempo médio entre absorções do nêutron. Seu inverso está associado com a taxa de reações de absorção. A definição usual de l inclui um termo relacionado com a fuga de nêutrons pela fronteira do sistema, que no caso monoenergético é $1/(1 + DB_g^2/\Sigma_a)$ multiplicando $1/(v\Sigma_a)$ [2]. Porém, considerando reatores de grandes dimensões, da ordem de alguns metros, é possível desprezar esse termo na definição do tempo médio de vida dos nêutrons prontos, como foi feito na definição (2.27g) [11].

O parâmetro Λ é chamado de tempo médio de geração de nêutrons, que caracteriza o tempo médio entre a geração de um nêutron e sua subsequente absorção causando fissão [2], [5], [8], [9].

O parâmetro τ é chamado de tempo de relaxação por ESPINOSA-PAREDES *et. al* [11]. NUNES *et. al* [1] define $f_d = \tau^{-1} = v\Sigma_{tr}$ como frequência de transporte,

que está relacionado com a taxa de reações de transporte do nêutron, enquanto que o tempo de relaxação seria o tempo médio entre estas reações.

O parâmetro β_i redefine as frações de nêutrons atrasados, sendo entendido como uma fração efetiva. Os nêutrons nascidos do decaimento de precursores são liberados com energias menores que dos nêutrons prontos, necessitando, assim, de menos moderação para atingir a faixa térmica de energia. A expressão (2.27e) modifica a magnitude das frações de nêutrons atrasados para levar isso em conta.

Há casos em que o espectro de energia dos nêutrons atrasados e dos nêutrons prontos (χ_i e χ_f) são iguais, como no caso monoenergético e no caso de divisões de grupos de energia no qual ambos espectros estão inteiramente contidos em apenas um grupo de energia. Nesses casos, a expressão (2.27e) mostra que as frações efetivas de nêutrons atrasados são iguais aos valores tabelados das frações de nêutrons atrasados para cada isótopo.

Quando se considera diferentes isótopos sofrendo fissão, a fração efetiva pode ser interpretada como uma média da fração de nêutrons atrasados dos isótopos envolvidos [5], [8]. Como neste projeto foram considerados apenas os casos descritos no parágrafo anterior e de apenas um isótopo sofrendo fissão, pode-se usar o mesmo símbolo β_i tanto para as frações de nêutrons atrasados tabeladas quanto para as frações efetivas.

Capítulo 3

Aproximações para as Equações da Cinética Pontual Modificada

3.1 Análise da Ordem de Grandeza dos Termos das Equações da Cinética Pontual Modificada

Para poder avaliar possíveis aproximações para as equações da cinética pontual modificada (equações (2.28a) e (2.28b)), deve-se analisar as ordens de grandeza dos parâmetros envolvidos. Para facilitar, escreve-se a equação (2.28a) da seguinte forma:

$$A \frac{d^2 n(t)}{dt^2} + B \frac{dn(t)}{dt} = Cn(t) + \sum_{i=1}^6 DC_i(t) + \sum_{i=1}^6 E \frac{dC_i(t)}{dt} \quad (3.1)$$

onde:

$$A \equiv \tau \quad (3.2a)$$

$$B \equiv 1 + \tau \left[\frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right] \quad (3.2b)$$

$$C \equiv \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} \quad (3.2c)$$

$$D \equiv \lambda_i \quad (3.2d)$$

$$E \equiv \tau \lambda_i \quad (3.2e)$$

Pelos valores comumente usados na literatura [1], [2], [10], [11], [14], [15], [16], a ordem de grandeza dos parâmetros cinéticos variam, em geral, entre os seguintes intervalos:

$$\begin{aligned}
10^{-6}s < \Lambda < 10^{-3}s \\
10^{-6}s < l < 10^{-4}s \\
10^{-3} < \beta < 10^{-2} \\
0 < |\rho| < \beta \\
10^{-2}s^{-1} < \lambda_i < 1s^{-1} \\
10^{-6}s < \tau < 10^{-3}s
\end{aligned}$$

Quando o tempo de relaxação τ tende a 0, a cinética modificada se reduz para a cinética clássica. Para não excluir os termos exclusivos da cinética modificada, o intervalo inferior de τ foi arbitrado para um valor pequeno mas não nulo.

Quando $\rho = \beta$, o sistema torna-se supercrítico apenas pelos nêutrons prontos. Como esse é um ponto de transição importante e também um caso extremo, é razoável analisar uma reatividade máxima um pouco menor que β , de forma que a diferença $\beta - \rho$ seja da ordem de 10^{-3} .

Substituindo os extremos dos intervalos dos parâmetros nas equações (3.2a) a (3.2e):

$$\begin{aligned}
10^{-6} < A < 10^{-3} \\
1 < B < 10 \\
1 < C < 10^3 \\
10^{-2} < D < 1 \\
10^{-8} < E < 10^{-3}
\end{aligned}$$

Como pode-se ver, entre os coeficientes da densidade de nêutrons e suas derivadas, o coeficiente do termo $d^2n(t)/dt^2$ possui ordens de grandeza muito menor que os outros, podendo, assim, ser desprezado. Para comparar os coeficientes dos precursores e suas derivadas, pode-se substituir a equação (2.28b) na equação (2.28a):

$$\begin{aligned}
\tau \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left[1 + \tau \left(\frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right) \right] \frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \\
+ \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i \beta_i \tau}{\Lambda} n(t) - \sum_{i=1}^6 \lambda_i^2 \tau C_i(t)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

As derivadas dos precursores acrescentam dois termos: $\sum_{i=1}^6 \lambda_i \beta_i \tau / \Lambda$ no coeficiente de $n(t)$ e $-\sum_{i=1}^6 \lambda_i^2 \tau$ no coeficiente de $C_i(t)$. Pelas ordens de grandeza

consideradas para os parâmetros, conclui-se que os termos acrescentados pelas derivadas dos precursores são desprezíveis em comparação aos outros coeficientes. Dessa forma, uma aproximação possível é desprezar os termos $d^2n(t)/dt^2$ e $dC_i(t)/dt$:

$$\left[1 + \tau \left(\frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda}\right)\right] \frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (3.4)$$

Como a equação dos precursores (2.28b) permanece inalterada, essa aproximação feita transforma as equações da cinética pontual modificada em equações diferenciais iguais às das equações da cinética pontual clássica, com apenas um coeficiente multiplicando o termo $dn(t)/dt$. Na próxima seção será mostrado que esse coeficiente pode ser agrupado com o parâmetro do tempo médio de geração de nêutrons Λ , podendo ser representado por um parâmetro corrigido Λ_c .

3.2 Equações da Cinética Pontual Corrigida

Com a aproximação feita na seção anterior, as equações da cinética modificada ficam:

$$K \frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (3.5a)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad i = 1, \dots, 6 \quad (3.5b)$$

onde K é uma constante adimensional:

$$K = 1 + \tau \left[\frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right] \quad (3.6)$$

Dividindo as equações (3.5a) e (3.5b) por K e definindo os seguintes termos:

$$\Lambda_c = \Lambda K \quad (3.7a)$$

$$\hat{C}_i(t) = \frac{C_i(t)}{K} \quad (3.7b)$$

As equações da cinética modificada, com a aproximação, ficam:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda_c} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \hat{C}_i(t) \quad (3.8a)$$

$$\frac{d\hat{C}_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda_c} n(t) - \lambda_i \hat{C}_i(t) \quad i = 1, \dots, 6 \quad (3.8b)$$

O parâmetro Λ_c , o tempo médio de geração corrigido, é o parâmetro Λ multiplicado por um fator de ajuste K . A concentração de precursores $C_i(t)$ é substituída por uma concentração ajustada $\hat{C}_i(t)$. Como $C_i(t)$ e $\hat{C}_i(t)$ diferem por apenas um termo multiplicativo e a grandeza de interesse é $n(t)$, é de maior praticidade redefinir $C_i(t)$ para o valor ajustado $C_i(t)/K$. Assim, define-se as equações da cinética pontual corrigida:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda_c} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (3.9a)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda_c} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad i = 1, \dots, 6 \quad (3.9b)$$

A vantagem dessa aproximação, em relação à cinética modificada, é a semelhança com as equações da cinética pontual, precisando apenas trocar o valor de Λ por um valor ajustado pelo termo K da equação (3.6):

$$\Lambda_c \equiv \left\{ 1 + \tau \left[\frac{1}{l} - \frac{(1 - \beta)}{\Lambda} \right] \right\} \Lambda \quad (3.10)$$

Vale ressaltar que os valores das concentrações de precursores não serão iguais para a cinética clássica e corrigida. No entanto, como a única grandeza de interesse é a densidade de nêutrons $n(t)$, pode-se representar a concentração ajustada de precursores como $C_i(t)$.

3.3 Condições de Validade das Equações da Cinética Pontual Modificada e Corrigida

Como o tempo médio de geração de nêutrons Λ é um parâmetro físico e que deve ser positivo, é natural que se imponha essa mesma restrição sobre o valor ajustado Λ_c :

$$\begin{aligned} \Lambda_c &> 0 \\ \left\{ 1 + \tau \left[\frac{1}{l} - \frac{(1 - \beta)}{\Lambda} \right] \right\} \Lambda &> 0 \end{aligned}$$

Para que as equações da cinética corrigida sejam válidas, a seguinte condição deve ser satisfeita:

$$\frac{1}{l} + \frac{1}{\tau} > \frac{1 - \beta}{\Lambda} \quad (3.11)$$

Essa condição também se aplica à cinética modificada. Para a demonstração, é útil partir da solução dessas equações para 1 grupo de precursores, o que será feito no próximo capítulo.

Capítulo 4

Soluções de Alguns Casos das Equações da Cinética Pontual Modificada e Corrigida

Neste capítulo, as equações da cinética pontual serão resolvidas para dois tipos de inserção de reatividade: em degrau (ou constante: $\rho(t) = \rho_0$) e em rampa (ou linear: $\rho(t) = \rho_0 + \alpha t$), ambos tanto para 1 grupo quanto para 6 grupos de precursores.

Para o caso de reatividade constante, as equações para um grupo de precursores possuem solução analítica simples tanto para a cinética clássica quanto para a cinética modificada. Nos outros casos, as soluções analíticas que possam existir são muito complexas, sendo mais conveniente utilizar métodos numéricos para resolvê-los.

O problema de reatividade constante para 6 grupos de precursores pode ser visto como um caso particular de reatividade linear, apenas anulando o coeficiente angular α da reta de reatividade nas equações apresentadas na seção 4.4.

4.1 Reatividade Constante: Solução Analítica para 1 Grupo de Precursores

4.1.1 Cinética Clássica

As equações da cinética pontual clássica, com 1 grupo de precursores e reatividade constante, são:

$$\dot{n} = \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} n + \lambda C \quad (4.1a)$$

$$\dot{C} = \frac{\beta}{\Lambda}n - \lambda C \quad (4.1b)$$

onde:

$$n \equiv n(t) \quad (4.2a)$$

$$\dot{n} \equiv \frac{dn(t)}{dt} \quad (4.2b)$$

$$C \equiv C(t) \quad (4.2c)$$

$$\dot{C} \equiv \frac{dC(t)}{dt} \quad (4.2d)$$

Somando as equações (4.1a) e (4.1b):

$$\dot{n} = \frac{\rho_0}{\Lambda}n - \dot{C} \quad (4.3)$$

Derivando a equação (4.1a), substituindo \dot{C} pela sua expressão de (4.3) e multiplicando a equação resultante por Λ :

$$\Lambda\ddot{n} + (\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)\dot{n} - \lambda\rho_0n = 0 \quad (4.4)$$

Considerando uma solução do tipo exponencial ($n(t) = e^{rt}$) e substituindo na equação (4.4), chega-se na equação característica do problema:

$$\Lambda r^2 + (\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)r - \lambda\rho_0 = 0 \quad (4.5)$$

A equação (4.5) pode ser reescrita como:

$$Ar^2 + Br - C = 0 \quad (4.6)$$

onde:

$$A \equiv \Lambda \quad (4.7a)$$

$$B \equiv \lambda\Lambda + \beta - \rho_0 \quad (4.7b)$$

$$C \equiv \lambda\rho_0 \quad (4.7c)$$

As soluções da equação (4.6) são:

$$r_1 = \frac{-B + \sqrt{(B^2 + 4AC)}}{2A} \quad (4.8a)$$

$$r_2 = \frac{-B - \sqrt{(B^2 + 4AC)}}{2A} \quad (4.8b)$$

A expressão para $n(t)$ fica:

$$n(t) = K_1 e^{r_1 t} + K_2 e^{r_2 t} \quad (4.9)$$

As condições iniciais são:

$$n(0) = n_0 \quad (4.10a)$$

$$\dot{C}(0) = 0 \quad (4.10b)$$

Avaliando a equação (4.1b) em $t = 0$ e substituindo as condições iniciais, tem-se que:

$$C(0) = \frac{\beta}{\Lambda} n_0 \quad (4.11)$$

Avaliando a equação (4.1a) em $t = 0$ e substituindo as condições iniciais e $C(0)$ da equação (4.11):

$$\dot{n}(0) = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \quad (4.12)$$

Derivando a equação (4.9) e aplicando as condições iniciais:

$$K_1 + K_2 = n_0 \quad (4.13a)$$

$$K_1 r_1 + K_2 r_2 = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \quad (4.13b)$$

A solução do sistema de equações (4.13a) e (4.13b) é:

$$K_1 = \frac{\rho_0/\Lambda - r_2}{r_1 - r_2} n_0 \quad (4.14a)$$

$$K_2 = \frac{r_1 - \rho_0/\Lambda}{r_1 - r_2} n_0 \quad (4.14b)$$

Assim, a solução das equações da cinética clássica, com um grupo de precursores e com reatividade constante, é dada pela equação (4.9), onde r_1 e r_2 são dados pelas equações (4.8a) e (4.8b), e K_1 e K_2 são dados pelas equações (4.14a) e (4.14b).

4.1.2 Cinética Corrigida

Como foi mostrado, as equações da cinética corrigida são parecidas com as da cinética clássica, precisando apenas trocar Λ por Λ_c . Dessa forma, a solução das equações da cinética corrigida é:

$$n(t) = K_1 e^{r_1 t} + K_2 e^{r_2 t} \quad (4.15)$$

onde:

$$\Lambda_c = \left\{ 1 + \tau \left[\frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right] \right\} \Lambda \quad (4.16a)$$

$$A \equiv \Lambda_c \quad (4.16b)$$

$$B \equiv \lambda \Lambda_c + \beta - \rho_0 \quad (4.16c)$$

$$C \equiv \lambda \rho_0 \quad (4.16d)$$

$$K_1 = \frac{\rho_0 / \Lambda_c - r_2}{r_1 - r_2} n_0 \quad (4.16e)$$

$$K_2 = \frac{r_1 - \rho_0 / \Lambda_c}{r_1 - r_2} n_0 \quad (4.16f)$$

$$r_1 = \frac{-B + \sqrt{(B^2 + 4AC)}}{2A} \quad (4.16g)$$

$$r_2 = \frac{-B - \sqrt{(B^2 + 4AC)}}{2A} \quad (4.16h)$$

4.1.3 Cinética Modificada

As equações da cinética pontual modificada, com 1 grupo de precursores e reatividade constante, são:

$$\tau \ddot{n} + \frac{\Lambda_c}{\Lambda} \dot{n} = \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} n + \lambda C + \lambda \tau \dot{C} \quad (4.17a)$$

$$\dot{C} = \frac{\beta}{\Lambda} n - \lambda C \quad (4.17b)$$

onde:

$$n \equiv n(t) \quad (4.18a)$$

$$\dot{n} \equiv \frac{dn(t)}{dt} \quad (4.18b)$$

$$\ddot{n} \equiv \frac{d^2n(t)}{dt^2} \quad (4.18c)$$

$$C \equiv C(t) \quad (4.18d)$$

$$\dot{C} \equiv \frac{dC(t)}{dt} \quad (4.18e)$$

$$\Lambda_c \equiv \left\{ 1 + \tau \left[\frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} \right] \right\} \Lambda \quad (4.18f)$$

Somando as equações (4.17a) e (4.17b):

$$\tau \ddot{n} + \frac{\Lambda_c}{\Lambda} \dot{n} = \frac{\rho_0}{\Lambda} n + (\lambda \tau - 1) \dot{C} \quad (4.19)$$

Substituindo o termo \dot{C} pela equação (4.17b) e derivando todos os termos:

$$\tau \ddot{n} + \frac{\Lambda_c}{\Lambda} \ddot{n} = \left(\frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} + \frac{\lambda \beta \tau}{\Lambda} \right) \dot{n} + (\lambda - \lambda^2 \tau) \dot{C} \quad (4.20)$$

Multiplicando a equação (4.19) por λ , somando-a com a equação (4.20) e multiplicando o resultado por Λ :

$$\tau \Lambda \ddot{n} + (\Lambda_c + \lambda \tau \Lambda) \ddot{n} + (\lambda \Lambda_c + \beta - \rho_0 - \lambda \beta \tau) \dot{n} - \lambda \rho_0 n = 0 \quad (4.21)$$

Considerando uma solução do tipo exponencial ($n(t) = e^{rt}$) e substituindo na equação (4.21), chega-se na equação característica do problema:

$$\tau \Lambda r^3 + (\Lambda_c + \lambda \tau \Lambda) r^2 + (\lambda \Lambda_c + \beta - \rho_0 - \lambda \beta \tau) r - \lambda \rho_0 = 0 \quad (4.22)$$

que pode ser reescrita como:

$$Ar^3 + Br^2 + Cr - D = 0 \quad (4.23)$$

onde:

$$A \equiv \tau \Lambda \quad (4.24a)$$

$$B \equiv \Lambda_c + \lambda \tau \Lambda \quad (4.24b)$$

$$C \equiv \lambda \Lambda_c + \beta - \rho_0 - \lambda \beta \tau \quad (4.24c)$$

$$D \equiv \lambda \rho_0 \quad (4.24d)$$

Como o termo A é muito menor que os outros termos, para encontrar duas das raízes desse polinômio pode-se considerar $A \approx 0$:

$$Br^2 + Cr - D = 0 \quad (4.25)$$

Como já foi visto, as soluções da equação do segundo grau (4.25) são:

$$r_1 = \frac{-C + \sqrt{(C^2 + 4BD)}}{2B} \quad (4.26a)$$

$$r_2 = \frac{-C - \sqrt{(C^2 + 4BD)}}{2B} \quad (4.26b)$$

Para encontrar a terceira raiz, pode-se usar as seguintes relações entre as raízes de um polinômio do terceiro grau:

$$r_1 + r_2 + r_3 = -\frac{B}{A} \quad (4.27a)$$

$$r_1 r_2 + r_1 r_3 + r_2 r_3 = \frac{C}{A} \quad (4.27b)$$

$$r_1 r_2 r_3 = \frac{D}{A} \quad (4.27c)$$

Essas relações também se aplicam ao polinômio do segundo grau da equação (4.25) da seguinte forma:

$$r_1 + r_2 = -\frac{C}{B} \quad (4.28a)$$

$$r_1 r_2 = -\frac{D}{B} \quad (4.28b)$$

O valor aproximado da raiz r_3 pode então, em princípio, ser obtida por uma das 3 equações resultantes:

$$r_3 = \frac{C}{B} - \frac{B}{A} \quad (4.29a)$$

$$r_3 = \frac{D}{C} - \frac{B}{A} \quad (4.29b)$$

$$r_3 = -\frac{B}{A} \quad (4.29c)$$

Considerando as ordens de grandeza dos parâmetros dados no capítulo 3, os coeficientes A , B , C e D possuem as seguintes ordens de grandeza:

$$10^{-12} < A < 10^{-6}$$

$$10^{-6} < B < 10^{-2}$$

$$10^{-8} < C < 10^{-2}$$

$$0 < D < 10^{-2}$$

Com isso, as ordens de grandeza das frações que aparecem na raiz r_3 são:

$$10^4 < \frac{B}{A} < 10^6 \quad (4.30a)$$

$$10^{-2} < \frac{C}{B} < 1 \quad (4.30b)$$

$$0 < \frac{D}{C} < 1 \quad (4.30c)$$

Como pode-se ver, o termo dominante é sempre B/A , com todas as três possibilidades para r_3 tendo valores bem próximos, sendo diferentes apenas pela aproximação feita ($A \approx 0$) para encontrar as outras duas raízes. Dessa forma, pode-se usar a equação (4.29c) para o valor de r_3 por ser a mais simples.

Com as raízes calculadas, a expressão para $n(t)$ fica:

$$n(t) = K_1 e^{r_1 t} + K_2 e^{r_2 t} + K_3 e^{r_3 t} \quad (4.31)$$

Derivando a equação (4.31) e aplicando as condições iniciais para $n(0)$, $\dot{n}(0)$ e $\ddot{n}(0)$:

$$K_1 + K_2 + K_3 = n(0) \quad (4.32a)$$

$$K_1 r_1 + K_2 r_2 + K_3 r_3 = \dot{n}(0) \quad (4.32b)$$

$$K_1 r_1^2 + K_2 r_2^2 + K_3 r_3^2 = \ddot{n}(0) \quad (4.32c)$$

Pode-se expressar essas equações na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ r_1 & r_2 & r_3 \\ r_1^2 & r_2^2 & r_3^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_1 \\ K_2 \\ K_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} n(0) \\ \dot{n}(0) \\ \ddot{n}(0) \end{bmatrix} \quad (4.33)$$

Resolvendo a equação matricial (4.33):

$$\begin{bmatrix} K_1 \\ K_2 \\ K_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{r_2 r_3 n(0) - (r_2 + r_3) \dot{n}(0) + \ddot{n}(0)}{(r_1 - r_2)(r_1 - r_3)} \\ -\frac{r_1 r_3 n(0) + (r_1 + r_3) \dot{n}(0) - \ddot{n}(0)}{(r_1 - r_2)(r_2 - r_3)} \\ \frac{r_1 r_2 n(0) - (r_1 + r_2) \dot{n}(0) + \ddot{n}(0)}{(r_1 - r_3)(r_2 - r_3)} \end{bmatrix} \quad (4.34)$$

Assim, a solução das equações da cinética modificada, com um grupo de precursores e com reatividade constante, é dada pela equação (4.31), onde r_1 , r_2 e r_3 são dados pelas equações (4.26a), (4.26b) e (4.29c), e K_1 , K_2 e K_3 são dados pela equação (4.34).

A condição inicial de $n(0)$ é a mesma do problema da cinética inversa. Para as condições iniciais $\dot{n}(0)$ e $\ddot{n}(0)$, duas possibilidades podem ser sugeridas. NUNES *et. al* [1] define $\dot{n}(0)$ a partir da condição inicial do problema da cinética clássica:

$$\dot{n}(0) = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \quad (4.35)$$

Para encontrar $\ddot{n}(0)$, avalia-se a equação (4.17a) em $t = 0$:

$$\ddot{n}(0) = \left[\frac{\Lambda - \Lambda_c}{\tau} \right] \frac{\rho_0}{\Lambda^2} n_0 \quad (4.36)$$

Outra possibilidade é definir $\dot{n}(0)$ pela mesma condição inicial do problema da cinética corrigida:

$$\dot{n}(0) = \frac{\rho_0}{\Lambda_c} n_0 \quad (4.37)$$

Dessa forma, avaliando a equação (4.17a) em $t = 0$:

$$\ddot{n}(0) = 0 \quad (4.38)$$

Apesar de serem valores bem diferentes para $\ddot{n}(0)$, ao substituir as respectivas condições iniciais na equação (4.34), os valores dos coeficientes K_1 e K_2 se mantêm próximos para ambas possibilidades de condições iniciais, enquanto que o coeficiente K_3 varia em algumas ordens de grandeza.

Como já foi visto na inequação (4.30a), a ordem de grandeza de $r_3 = -B/A$ está entre 10^4 e 10^6 . Como r_3 é negativo, a exponencial que acompanha o coeficiente K_3 tende a zero muito rapidamente. Dessa forma, a variação de ordem de grandeza de K_3 entre as duas possibilidades de condições iniciais não influencia no valor de $n(t)$. Sendo assim, posteriormente para a solução das equações da cinética modificada, serão usadas sempre as seguintes condições iniciais:

$$\dot{n}(0) = \frac{\rho_0}{\Lambda_c} n_0 \quad (4.39a)$$

$$\ddot{n}(0) = 0 \quad (4.39b)$$

Para mostrar que a condição de validade (3.11) se aplica à cinética modificada, substitui-se a expressão de Λ_c na expressão para r_3 :

$$r_3 = - \left[\frac{1}{\tau} + \frac{1}{l} - \frac{1 - \beta}{\Lambda} + \lambda \right]$$

Para que r_3 seja negativo, tem-se a seguinte condição:

$$\frac{1}{\tau} + \frac{1}{l} > \frac{1 - \beta}{\Lambda} - \lambda$$

Como $\lambda \ll (1 - \beta)/\Lambda$, essa condição pode ser aproximada para a mesma condição da equação (3.11):

$$\frac{1}{\tau} + \frac{1}{l} > \frac{1 - \beta}{\Lambda}$$

Se essa condição não fosse satisfeita, r_3 seria positivo independente de a reatividade ser positiva ou negativa, deixando de reproduzir o resultado esperado de

densidade de nêutrons tendendo a zero para um reator subcrítico (reatividade negativa). Além disso, mesmo no caso de reatividade positiva, r_3 sendo positivo e com uma magnitude muito alta faria com que a solução crescesse além do esperado para reatividades abaixo de β . Assim, a condição (3.11) também se aplica às equações da cinética modificada.

4.2 Método de Diferenças Finitas

Como já foi dito, serão utilizados métodos numéricos para tratar de casos no qual a reatividade não é constante. O método a ser usado é o de diferenças finitas, que consiste em discretizar a variável temporal e calcular a função nos pontos discretos [12], [13]. Considerando uma equação diferencial ordinária de primeira ordem linear genérica:

$$\frac{df(t)}{dt} = F(t)f(t)$$

onde $F(t)$ é uma função arbitrária do tempo. Sendo $f_j = f(t_j)$ e $t_j = t_0 + j\Delta t$ para j inteiro ou semi-inteiro, avalia-se essa equação no ponto $t_{j+1/2}$:

$$\frac{df(t_{j+1/2})}{dt} = F(t_{j+1/2})f(t_{j+1/2})$$

A derivada da função no ponto $t_{j+1/2}$ é aproximada da seguinte forma:

$$\frac{df(t_{j+1/2})}{dt} \cong \frac{f(t_{j+1}) - f(t_j)}{\Delta t}$$

A função avaliada no ponto $t_{j+1/2}$ é aproximada pela média da função avaliada nos pontos j e $j + 1$:

$$f(t_{j+1/2}) \cong \frac{f(t_{j+1}) + f(t_j)}{2}$$

A equação diferencial então fica:

$$\begin{aligned} \frac{f_{j+1} - f_j}{\Delta t} &= F(t_{j+1/2}) \frac{f_{j+1} + f_j}{2} \\ (2 - F(t_{j+1/2})\Delta t) f_{j+1} &= (2 + F(t_{j+1/2})\Delta t) f_j \\ f_{j+1} &= \frac{(2 + F(t_{j+1/2})\Delta t)}{(2 - F(t_{j+1/2})\Delta t)} f_j \end{aligned}$$

A partir de uma condição inicial $f_0 = f(0)$, é obtido o valor da função a cada passo temporal Δt . O resultado torna-se mais preciso quanto menor for o valor

do passo. Esse método adotado é dito implícito, ou seja, a equação possui uma dependência implícita da solução.

No caso de uma EDO linear de segunda ordem, primeiro se faz a substituição $g(t) = df(t)/dt$:

$$\begin{aligned}\frac{d^2 f(t)}{dt^2} + G(t) \frac{df(t)}{dt} &= F(t)f(t) \\ \frac{dg(t)}{dt} + G(t)g(t) &= F(t)f(t)\end{aligned}$$

obtendo, assim, um sistema de equações:

$$\begin{aligned}\frac{df(t)}{dt} &= g(t) \\ \frac{dg(t)}{dt} &= F(t)f(t) - G(t)g(t)\end{aligned}$$

Pode-se escrever a equação na forma matricial:

$$\frac{dV(t)}{dt} = M(t)V(t)$$

onde:

$$\begin{aligned}V(t) &= \begin{bmatrix} f(t) \\ g(t) \end{bmatrix} \\ M(t) &= \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ F(t) & -G(t) \end{bmatrix}\end{aligned}$$

Avalia-se a equação matricial no ponto $t_{j+1/2}$:

$$\begin{aligned}\frac{V_{j+1} - V_j}{\Delta t} &= M(t_{j+1/2}) \frac{V_{j+1} + V_j}{2} \\ V_{j+1} &= (2I - M(t_{j+1/2})\Delta t)^{-1} (2I + M(t_{j+1/2})\Delta t) V_j\end{aligned}\tag{4.40}$$

onde I indica sempre a matriz identidade com a mesma dimensão de $M(t)$. As condições iniciais são dadas em $t = 0$, logo $t_0 = 0$ e:

$$V_0 = \begin{bmatrix} f(0) \\ \dot{f}(0) \end{bmatrix}$$

onde:

$$\dot{f}(t) \equiv \frac{df(t)}{dt}$$

Em todos os casos estudados, a solução é obtida sempre pela equação (4.40), sendo diferente apenas as matrizes $V(t)$, V_0 e $M(t)$. Dessa forma, cada caso pode ser descrito apenas definindo cada uma dessas matrizes, com a solução sendo obtida iterativamente.

4.3 Reatividade Linear: Solução por Diferenças Finitas para 1 Grupo de Precursores

4.3.1 Cinética Clássica

As equações da cinética pontual clássica, com 1 grupo de precursores e reatividade $\rho(t) = \rho_0 + \alpha t$ são:

$$\dot{n} = \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda} n + \lambda C \quad (4.41a)$$

$$\dot{C} = \frac{\beta}{\Lambda} n - \lambda C \quad (4.41b)$$

A solução é dada pela equação (4.40), onde:

$$V(t) = \begin{bmatrix} n(t) \\ C(t) \end{bmatrix} \quad (4.42a)$$

$$M(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda} & \lambda \\ \beta/\Lambda & -\lambda \end{bmatrix} \quad (4.42b)$$

$$V_0 = \begin{bmatrix} n(0) \\ C(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \beta/(\lambda\Lambda) \end{bmatrix} n_0 \quad (4.42c)$$

4.3.2 Cinética Corrigida

As equações da cinética pontual corrigida são iguais às da clássica, apenas trocando Λ por Λ_c . Assim, esse caso é resolvido pela equação (4.40), onde:

$$V(t) = \begin{bmatrix} n(t) \\ C(t) \end{bmatrix} \quad (4.43a)$$

$$M(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda_c} & \lambda \\ \beta/\Lambda_c & -\lambda \end{bmatrix} \quad (4.43b)$$

$$V_0 = \begin{bmatrix} n(0) \\ C(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \beta/(\lambda\Lambda_c) \end{bmatrix} n_0 \quad (4.43c)$$

4.3.3 Cinética Modificada

As equações da cinética pontual modificada, com 1 grupo de precursores e reatividade $\rho(t) = \rho_0 + \alpha t$ são:

$$\tau \ddot{n} + \frac{\Lambda_c}{\Lambda} \dot{n} = \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda} n + \lambda C + \lambda \tau \dot{C} \quad (4.44a)$$

$$\dot{C} = \frac{\beta}{\Lambda}n - \lambda C \quad (4.44b)$$

Fazendo $\dot{n}(t) = y(t)$:

$$\dot{n} = y \quad (4.45a)$$

$$\tau \dot{y} + \frac{\Lambda_c}{\Lambda}y = \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda}n + \lambda C + \lambda \tau \dot{C} \quad (4.45b)$$

$$\dot{C} = \frac{\beta}{\Lambda}n - \lambda C \quad (4.45c)$$

Substituindo a equação (4.45c) na equação (4.45b) e isolando as derivadas no lado esquerdo da equação:

$$\dot{n} = y \quad (4.46a)$$

$$\dot{y} = \left[\frac{\rho_0 + \alpha t - \beta + \lambda \tau \beta}{\tau \Lambda} \right] n - \frac{\Lambda_c}{\tau \Lambda} y + \left[\frac{\lambda - \lambda^2 \tau}{\tau} \right] C \quad (4.46b)$$

$$\dot{C} = \frac{\beta}{\Lambda}n - \lambda C \quad (4.46c)$$

Esse problema é resolvido pela equação (4.40), onde:

$$V(t) = \begin{bmatrix} n(t) \\ y(t) \\ C(t) \end{bmatrix} \quad (4.47a)$$

$$M(t) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta + \lambda \tau \beta}{\tau \Lambda} & -\frac{\Lambda_c}{\tau \Lambda} & \frac{\lambda - \lambda^2 \tau}{\tau} \\ \beta/\Lambda & 0 & -\lambda \end{bmatrix} \quad (4.47b)$$

$$V_0 = \begin{bmatrix} n(0) \\ y(0) \\ C(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \rho_0/\Lambda_c \\ \beta/(\lambda \Lambda) \end{bmatrix} n_0 \quad (4.47c)$$

4.4 Reatividade Linear: Solução por Diferenças Finitas para 6 Grupos de Precursores

4.4.1 Cinética Clássica

As equações da cinética pontual clássica, com 6 grupos de precursores e reatividade $\rho(t) = \rho_0 + \alpha t$ são:

$$\dot{n} = \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda}n + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i \quad (4.48a)$$

$$\dot{C}_i = \frac{\beta_i}{\Lambda} n - \lambda_i C_i, \quad i = 1, \dots, 6 \quad (4.48b)$$

Esse caso é resolvido pela equação (4.40), onde:

$$V(t) = \begin{bmatrix} n(t) \\ C_1(t) \\ C_2(t) \\ \vdots \\ C_6(t) \end{bmatrix} \quad (4.49a)$$

$$M(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda} & \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_6 \\ \beta_1/\Lambda & -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_2/\Lambda & 0 & -\lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \beta_6/\Lambda & 0 & 0 & \dots & -\lambda_6 \end{bmatrix} \quad (4.49b)$$

$$V_0 = \begin{bmatrix} n(0) \\ C_1(0) \\ \vdots \\ C_6(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \beta_1/(\lambda_1 \Lambda) \\ \vdots \\ \beta_6/(\lambda_6 \Lambda) \end{bmatrix} n_0 \quad (4.49c)$$

4.4.2 Cinética Corrigida

As equações da cinética pontual corrigida são iguais às da clássica, apenas trocando Λ por Λ_c . Assim, esse caso é resolvido pela equação (4.40), onde:

$$V(t) = \begin{bmatrix} n(t) \\ C_1(t) \\ C_2(t) \\ \vdots \\ C_6(t) \end{bmatrix} \quad (4.50a)$$

$$M(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda_c} & \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_6 \\ \beta_1/\Lambda_c & -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_2/\Lambda_c & 0 & -\lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \beta_6/\Lambda_c & 0 & 0 & \dots & -\lambda_6 \end{bmatrix} \quad (4.50b)$$

$$V_0 = \begin{bmatrix} n(0) \\ C_1(0) \\ \vdots \\ C_6(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \beta_1/(\lambda_1\Lambda_c) \\ \vdots \\ \beta_6/(\lambda_6\Lambda_c) \end{bmatrix} n_0 \quad (4.50c)$$

4.4.3 Cinética Modificada

As equações da cinética pontual modificada, com 6 grupos de precursores e reatividade $\rho(t) = \rho_0 + \alpha t$ são:

$$\tau \ddot{n} + \frac{\Lambda_c}{\Lambda} \dot{n} = \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda} n + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \tau \dot{C}_i \quad (4.51a)$$

$$\dot{C}_i = \frac{\beta_i}{\Lambda} n - \lambda_i C_i, \quad i = 1, \dots, 6 \quad (4.51b)$$

Fazendo $\dot{n}(t) = y(t)$:

$$\dot{n} = y \quad (4.52a)$$

$$\tau \dot{y} + \frac{\Lambda_c}{\Lambda} y = \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\Lambda} n + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \tau \dot{C}_i \quad (4.52b)$$

$$\dot{C}_i = \frac{\beta_i}{\Lambda} n - \lambda_i C_i, \quad i = 1, \dots, 6 \quad (4.52c)$$

Substituindo a equação (4.52c) na equação (4.52b) e isolando as derivadas no lado esquerdo da equação:

$$\dot{n} = y \quad (4.53a)$$

$$\dot{y} = \left[\frac{\rho_0 + \alpha t - \beta + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \beta_i \tau}{\tau \Lambda} \right] n - \frac{\Lambda_c}{\tau \Lambda} y + \sum_{i=1}^6 \left[\frac{\lambda_i - \lambda_i^2 \tau}{\tau} \right] C_i \quad (4.53b)$$

$$\dot{C}_i = \frac{\beta_i}{\Lambda} n - \lambda_i C_i, \quad i = 1, \dots, 6 \quad (4.53c)$$

Esse problema é resolvido pela equação (4.40), onde:

$$V(t) = \begin{bmatrix} n(t) \\ y(t) \\ C_1(t) \\ C_2(t) \\ \vdots \\ C_6(t) \end{bmatrix} \quad (4.54a)$$

$$M(t) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\rho_0 + \alpha t - \beta}{\tau \Lambda} + \sum_{i=1}^6 \left[\frac{\lambda_i \beta_i}{\Lambda} \right] & -\frac{\Lambda_c}{\tau \Lambda} & \frac{\lambda_1}{\tau} - \lambda_1^2 & \frac{\lambda_2}{\tau} - \lambda_2^2 & \dots & \frac{\lambda_6}{\tau} - \lambda_6^2 \\ \beta_1/\Lambda & 0 & -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \beta_2/\Lambda & 0 & 0 & -\lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \beta_6/\Lambda & 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda_6 \end{bmatrix} \quad (4.54b)$$

$$V_0 = \begin{bmatrix} n(0) \\ y(0) \\ C_1(0) \\ \vdots \\ C_6(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ \rho_0/\Lambda_c \\ \beta_1/(\lambda_1 \Lambda) \\ \vdots \\ \beta_6/(\lambda_6 \Lambda) \end{bmatrix} n_0 \quad (4.54c)$$

Capítulo 5

Equações da Cinética Pontual Corrigida no Cálculo da Reatividade: Cinética Inversa

Uma aplicação importante das equações da cinética pontual de nêutrons é a chamada cinética inversa, na qual a reatividade é obtida para um dado histórico de potência. Como potência e densidade de nêutrons são diretamente proporcionais, a variável $n(t)$ pode indicar tanto um quanto o outro.

A cinética inversa pode ser obtida a partir das equações da cinética clássica, modificada ou corrigida. Para comparar cada modelo, subtrai-se a equação da cinética inversa clássica das respectivas equações obtidas pelos outros modelos sugeridos, e posteriormente é analisado o comportamento dos termos adicionais de cada modelo para alguns casos de histórico de potência [14].

5.1 Cinética Inversa pelas Equações da Cinética Pontual Clássica

As equações da cinética clássica são:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (5.1a)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad i = 1, \dots, 6 \quad (5.1b)$$

As condições iniciais são:

$$n(0) = n_0 \quad (5.2a)$$

$$C_i(0) = \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0 \quad i = 1, \dots, 6 \quad (5.2b)$$

Multiplicando cada equação de (5.1b) por $e^{\lambda_i t}$:

$$\begin{aligned} \frac{dC_i(t)}{dt} e^{\lambda_i t} + \lambda_i C_i(t) e^{\lambda_i t} &= \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) e^{\lambda_i t} \\ \frac{d}{dt} \left[C_i(t) e^{\lambda_i t} \right] &= \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) e^{\lambda_i t} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Trocando a variável de t para t' em (5.3), integrando em t' de 0 a t e usando as condições iniciais das equações (5.2a) e (5.2b):

$$C_i(t) e^{\lambda_i t} - C_i(0) = \int_0^t \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t') e^{\lambda_i t'} dt' \quad (5.4)$$

Escrevendo $C_i(t)$ em função de $n(t)$:

$$C_i(t) = \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} \left[n_0 + \lambda_i \int_0^t n(t') e^{\lambda_i t'} dt' \right] e^{-\lambda_i t} \quad (5.5)$$

Substituindo a expressão para $C_i(t)$ de (5.5) na equação (5.1a):

$$\Lambda \dot{n}(t) = [\rho(t) - \beta] n(t) + \sum_{i=1}^6 \beta_i \left[n_0 + \lambda_i \int_0^t n(t') e^{\lambda_i t'} dt' \right] e^{-\lambda_i t} \quad (5.6)$$

Isolando a reatividade no lado esquerdo da equação (5.6), obtém-se a reatividade $\rho_c(t)$ em função do histórico de potência nuclear pelo modelo da cinética clássica:

$$\rho_c(t) = \beta + \Lambda \frac{\dot{n}(t)}{n(t)} - \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_i}{n(t)} \left[n_0 + \lambda_i \int_0^t n(t') e^{\lambda_i t'} dt' \right] e^{-\lambda_i t} \quad (5.7)$$

5.2 Cinética Inversa pelas Equações da Cinética Pontual Modificada

A equação para a densidade de nêutrons pela cinética modificada é:

$$\tau \Lambda \ddot{n}(t) + \Lambda_c \dot{n}(t) = [\rho(t) - \beta] n(t) + \Lambda \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) + \Lambda \sum_{i=1}^6 \lambda_i \tau \dot{C}_i(t) \quad (5.8)$$

Como a equação para a concentração dos precursores e as condições iniciais $n(0)$ e $C_i(0)$ são as mesmas tanto para a cinética clássica quanto para a modificada, substitui-se a expressão para $\dot{C}_i(t)$ da equação (5.1b) na (5.8), e depois substitui-se a expressão para $C_i(t)$ da equação (5.5) na equação resultante:

$$\tau \Lambda \ddot{n}(t) + \Lambda_c \dot{n}(t) = \left[\rho(t) - \beta + \sum_{i=1}^6 \tau \lambda_i \beta_i \right] n(t) + \Lambda \sum_{i=1}^6 (\lambda_i - \lambda_i^2 \tau) C_i(t) \quad (5.9)$$

$$\begin{aligned} \tau\Lambda\ddot{n}(t) + \Lambda_c\dot{n}(t) = & \left[\rho(t) - \beta + \sum_{i=1}^6 \tau\lambda_i\beta_i \right] n(t) \\ & + \sum_{i=1}^6 (1 - \lambda_i\tau)\beta_i \left[n_0 + \lambda_i \int_0^t n(t')e^{\lambda_it'} dt' \right] e^{-\lambda_it} \end{aligned} \quad (5.10)$$

Isolando a reatividade no lado esquerdo da equação (5.10), obtém-se a reatividade $\rho_m(t)$ em função do histórico de potência nuclear pelo modelo da cinética modificada:

$$\begin{aligned} \rho_{mod}(t) = & \beta - \sum_{i=1}^6 \tau\lambda_i\beta_i + \Lambda_c \frac{\dot{n}(t)}{n(t)} + \tau\Lambda \frac{\ddot{n}(t)}{n(t)} \\ & - \sum_{i=1}^6 (1 - \lambda_i\tau) \frac{\beta_i}{n(t)} \left[n_0 + \lambda_i \int_0^t n(t')e^{\lambda_it'} dt' \right] e^{-\lambda_it} \end{aligned} \quad (5.11)$$

Para comparar as reatividades obtidas pelos modelos de cinética clássica e modificada, subtrai-se $\rho_c(t)$ de $\rho_{mod}(t)$:

$$\begin{aligned} \Delta\rho_{mod}(t) = \rho_{mod}(t) - \rho_c(t) = & (\Lambda_c - \Lambda) \frac{\dot{n}(t)}{n(t)} + \tau \left\{ \Lambda \frac{\ddot{n}(t)}{n(t)} - \sum_{i=1}^6 \lambda_i\beta_i \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i\beta_i}{n(t)} \left[n_0 + \lambda_i \int_0^t n(t')e^{\lambda_it'} dt' \right] e^{-\lambda_it} \right\} \end{aligned} \quad (5.12)$$

A expressão para $\Delta\rho_{mod}(t)$ também é deduzida por PALMA *et. al* [14], diferindo de (5.12) apenas na notação dos parâmetros.

5.3 Cinética Inversa pelas Equações da Cinética Pontual Corrigida

Como a cinética corrigida é a cinética clássica com o ajuste no parâmetro do tempo médio de geração de nêutrons ($\Lambda \rightarrow \Lambda_c$), a equação da cinética inversa para o modelo de cinética corrigida é igual à equação para o modelo da clássica, fazendo a devida substituição:

$$\rho_{corr}(t) = \beta + \Lambda_c \frac{\dot{n}(t)}{n(t)} - \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_i}{n(t)} \left[n_0 + \lambda_i \int_0^t n(t')e^{\lambda_it'} dt' \right] e^{-\lambda_it} \quad (5.13)$$

Subtraindo a reatividade obtida pela cinética clássica da reatividade obtida pela cinética corrigida, pode-se comparar os diferentes modelos da mesma forma que

foi feita para a cinética modificada:

$$\Delta\rho_{corr}(t) = \rho_{corr}(t) - \rho_c(t) = (\Lambda_c - \Lambda)\frac{\dot{n}(t)}{n(t)} \quad (5.14)$$

5.4 Soluções Analíticas da Equação da Cinética Inversa

Nesta seção são obtidas as soluções analíticas para $\Delta\rho_{mod}(t)$ (5.12) e $\Delta\rho_{corr}(t)$ (5.14) para os casos de histórico de potência exponencial e de potência linear.

5.4.1 Histórico de Potência Exponencial: $n(t) = n_0 e^{\omega t}$

Como pode-se observar, a expressão de $\Delta\rho_{corr}(t)$ é apenas o primeiro termo de $\Delta\rho_{mod}(t)$ na equação (5.12). Dessa forma, é necessário calcular apenas a solução para $\Delta\rho_{mod}(t)$.

Considerando a densidade de nêutrons como uma função exponencial ($n(t) = n_0 e^{\omega t}$), a integral da expressão (5.12) fica:

$$\begin{aligned} \int_0^t n(t')e^{\lambda_i t'} dt' &= \int_0^t n_0 e^{\omega t'} e^{\lambda_i t'} dt' \\ &= n_0 \int_0^t e^{(\omega+\lambda_i)t'} dt' \\ &= \frac{n_0}{\omega + \lambda_i} e^{(\omega+\lambda_i)t'} \Big|_0^t \\ &= \frac{n_0}{\omega + \lambda_i} \left[e^{(\omega+\lambda_i)t} - 1 \right] \end{aligned} \quad (5.15)$$

Substituindo a expressão para a integral de (5.15) na equação (5.12), junto com as expressões de $n(t)$, $\dot{n}(t)$ e $\ddot{n}(t)$, e simplificando os termos, obtém-se a expressão para $\Delta\rho_{mod}(t)$ para o caso de histórico de potência exponencial:

$$\Delta\rho_{mod}(t) = (\Lambda_c - \Lambda)\omega + \tau \left\{ \Lambda\omega^2 + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i \beta_i \omega}{\omega + \lambda_i} \left[e^{-(\omega+\lambda_i)t} - 1 \right] \right\} \quad (5.16)$$

Pela equação (5.14), a expressão para $\Delta\rho_{corr}(t)$ fica:

$$\Delta\rho_{corr}(t) = (\Lambda_c - \Lambda)\omega \quad (5.17)$$

5.4.2 Histórico de Potência Linear: $n(t) = n_0 + \alpha t$

Considerando a densidade de nêutrons como uma função linear ($n(t) = n_0 + \alpha t$), a integral da expressão (5.12) fica:

$$\begin{aligned}
 \int_0^t n(t')e^{\lambda_i t'} dt' &= \int_0^t (n_0 + \alpha t')e^{\lambda_i t'} dt' \\
 &= n_0 \int_0^t e^{\lambda_i t'} dt' + \alpha \int_0^t t' e^{\lambda_i t'} dt' \\
 &= \frac{n_0}{\lambda_i} e^{\lambda_i t'} \Big|_0^t + \frac{\alpha}{\lambda_i^2} (\lambda_i t' - 1) e^{\lambda_i t'} \Big|_0^t \\
 &= \frac{n_0}{\lambda_i} \left[e^{\lambda_i t} - 1 \right] + \frac{\alpha}{\lambda_i^2} \left[(\lambda_i t - 1) e^{\lambda_i t} + 1 \right]
 \end{aligned} \tag{5.18}$$

Substituindo a expressão para a integral de (5.15) na equação (5.12), junto com as expressões de $n(t)$, $\dot{n}(t)$ e $\ddot{n}(t)$, e simplificando os termos, obtém-se a expressão para $\Delta\rho_{mod}(t)$ para o caso de histórico de potência linear:

$$\Delta\rho_{mod}(t) = (\Lambda_c - \Lambda) \frac{\alpha}{n_0 + \alpha t} + \tau \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_i \alpha}{n_0 + \alpha t} \left[e^{-\lambda_i t} - 1 \right] \tag{5.19}$$

Pela equação (5.14), a expressão para $\Delta\rho_{corr}(t)$ fica:

$$\Delta\rho_{corr}(t) = (\Lambda_c - \Lambda) \frac{\alpha}{n_0 + \alpha t} \tag{5.20}$$

Capítulo 6

Resultados

Para resolver as equações da cinética pontual, foram utilizados os dados usados por ESPINOSA-PAREDES *et. al* [11] para os parâmetros cinéticos e para os parâmetros dos grupos de precursores para o U-235:

Tabela 6.1: Parâmetros para os grupos de precursores do U-235

Grupo	β_i	$\lambda_i(s^{-1})$
1	0.000266	0.0127
2	0.001491	0.0317
3	0.001316	0.1550
4	0.002849	0.3110
5	0.000896	1.4000
6	0.000182	3.8700

Tabela 6.2: Parâmetros cinéticos

Λ	0.002 s
l	0.00024 s
$\lambda = \beta / \sum_{i=1}^6 [\beta_i / \lambda_i]$	0.0810958 s ⁻¹
$\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i$	0.007

O tempo de relaxação τ será variado para se analisar a sensibilidade desse parâmetro nas soluções.

6.1 Validação do Método de Diferenças Finitas

Para validar o método de diferenças finitas, será comparado o resultado da solução das equações da cinética pontual com 1 grupo de precursores e reatividade constante por esse método com a solução analítica.

Para isso, basta utilizar as equações de diferenças finitas respectivas a cada modelo de cinética para reatividade linear, com $\alpha = 0$.

Como os gráficos para os dois métodos de solução quase se sobrepõem, é mais prático para a validação do método analisar o erro relativo máximo entre as soluções para diferentes passos temporais e parâmetros cinéticos:

$$Erro = \max \left| \frac{n_a(t) - n_{DF}(t)}{n_a(t)} \right|, \quad (6.1)$$

onde $n_a(t)$ é a solução analítica e $n_{DF}(t)$ é a solução por diferenças finitas.

6.1.1 Cinética Clássica

Inicialmente, compara-se o erro relativo máximo para diferentes reatividades e diferentes passos temporais, apresentados na tabela 6.3.

Tabela 6.3: Erro relativo entre as soluções analítica e numérica

	$\Delta t = 10^{-2}s$	$\Delta t = 10^{-3}s$	$\Delta t = 10^{-4}s$
$\rho_0 = -0.006$	8.7×10^{-5}	8.7×10^{-7}	8.7×10^{-9}
$\rho_0 = -0.003$	2.9×10^{-5}	2.9×10^{-7}	2.9×10^{-9}
$\rho_0 = 0.001$	4.2×10^{-6}	4.2×10^{-8}	4.2×10^{-10}
$\rho_0 = 0.003$	6.5×10^{-6}	6.5×10^{-8}	6.5×10^{-10}
$\rho_0 = 0.006$	1.9×10^{-5}	1.9×10^{-7}	1.9×10^{-9}

O erro cresce com o módulo da reatividade, variando em até 1 ordem de grandeza, mas se mantendo sempre muito pequeno para os parâmetros usados. Considerando, agora, $\rho_0 = 0.006$ e variando Λ , pode-se analisar como o erro varia com Λ .

Tabela 6.4: Erro relativo entre as soluções analítica e numérica, com $\rho_0 = 0.006$ e variando Λ

	$\Delta t = 10^{-2}s$	$\Delta t = 10^{-3}s$	$\Delta t = 10^{-4}s$
$\Lambda = 2.0 \times 10^{-3}s$	1.9×10^{-5}	1.9×10^{-7}	1.9×10^{-9}
$\Lambda = 2.0 \times 10^{-4}s$	1.2×10^{-4}	1.2×10^{-6}	1.2×10^{-8}
$\Lambda = 2.0 \times 10^{-5}s$	1.2×10^{-2}	1.2×10^{-4}	1.2×10^{-6}
$\Lambda = 2.0 \times 10^{-6}s$	3.8×10^{-1}	1.2×10^{-2}	1.2×10^{-4}

Na tabela 6.4, vê-se que o erro cresce com a diminuição de Λ , podendo chegar a uma fração apreciável. Dessa forma, pode-se concluir que, para uma dada tolerância, o parâmetro Λ coloca uma cota máxima no passo a se utilizar. Considerando um erro relativo máximo admissível de 10^{-4} , ou 0.01%, tem-se que o passo a ser utilizado deve sempre ser, no máximo, uma ordem de grandeza maior que a ordem de grandeza de Λ .

6.1.2 Cinética Corrigida

Como a solução da cinética corrigida é equivalente à cinética clássica, mas substituindo Λ por Λ_c , pode-se chegar à mesma conclusão que para a cinética clássica: o passo temporal deve ser, no máximo, uma ordem de grandeza maior que a ordem de grandeza de Λ_c para se obter um erro relativo máximo de 0.01%.

6.1.3 Cinética Modificada

Neste caso, utiliza-se os dados das tabelas 6.1 e 6.2, com $\rho_0 = 0.006$ e τ variando.

Tabela 6.5: Erro relativo entre as soluções analítica e numérica, com $\rho_0 = 0.006$ e variando τ

	$\Delta t = 10^{-2}s$	$\Delta t = 10^{-3}s$	$\Delta t = 10^{-4}s$
$\tau = 10^{-3}s$	1.7×10^{-4}	1.7×10^{-4}	1.7×10^{-4}
$\tau = 10^{-4}s$	1.3×10^{-4}	1.4×10^{-4}	1.4×10^{-4}
$\tau = 10^{-5}s$	3.7×10^{-6}	2.2×10^{-5}	2.2×10^{-5}
$\tau = 10^{-6}s$	1.7×10^{-5}	2.1×10^{-6}	2.3×10^{-6}

Nota-se que, no caso da cinética modificada, o erro relativo máximo é maior que para a cinética clássica quando usa-se o mesmo passo, tendendo ao mesmo valor quando τ tende a 0. Mantendo fixo um valor para τ , o erro oscila um pouco, mas ainda continua baixo o suficiente.

Com essas comparações, concluiu-se que, para os dados utilizados (tabelas 6.1 e 6.2), um passo de 10^{-3} s é apropriado para os cálculos, considerando a precisão requerida e o tempo computacional gasto.

No caso de reatividade linear, a matriz dos coeficientes $M(t)$ varia a cada passo, mas apenas a componente da matriz que contém a reatividade varia. Nesse caso, pode-se considerar a maior reatividade do intervalo de tempo analisado (ρ_0 se $\alpha < 0$ ou $\rho_0 + \alpha T_{final}$ se $\alpha > 0$) para se ter uma estimativa do erro relativo máximo.

6.2 Resultados para Reatividade Constante com 1 Grupo de Precursores

Nesta seção são apresentados os resultados das equações da cinética pontual para cada modelo, considerando uma reatividade constante e apenas 1 grupo de precursores. Foram utilizados os métodos de solução apresentados na seção 4.1.

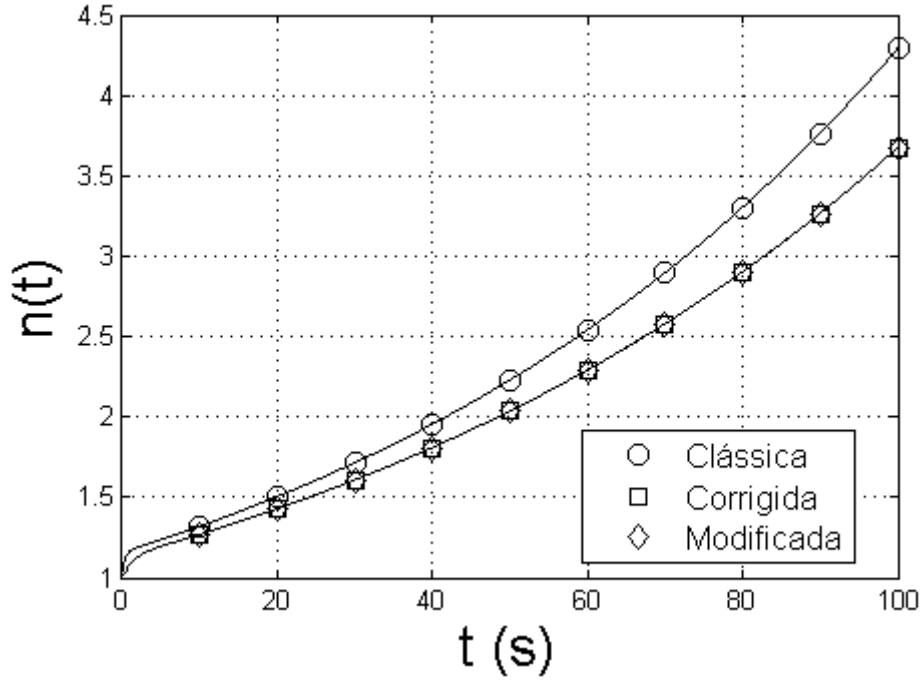


Figura 6.1: Solução dos diferentes modelos para reatividade constante com 1 grupo de precursores, com $\rho_0 = 0.001$ e $\tau = 10^{-3}s$

Como pode-se ver na figura 6.1, os gráficos das soluções para as cinéticas modificada e corrigida quase se sobrepõem, algo que acontece, novamente, mesmo variando-se a reatividade e o tempo de relaxação. Para que os resultados sejam melhor comparados, é mais útil analisar o erro relativo máximo entre eles:

$$Erro = \max \left| \frac{n_{mod}(t) - n_{corr}(t)}{n_{mod}(t)} \right|, \quad (6.2)$$

onde $n_{mod}(t)$ é a solução para a cinética modificada e $n_{corr}(t)$ é a solução para a cinética corrigida.

Dessa forma, pode-se fazer uma tabela variando a reatividade e o tempo de relaxação e analisar o erro relativo máximo para verificar que o modelo de cinética corrigida reproduz satisfatoriamente a cinética modificada em diversos casos.

Tabela 6.6: Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade constante com 1 grupo de precursores, variando ρ e τ , com $0s < t < 100s$

	$\rho_0 = -0.006$	$\rho_0 = -0.003$	$\rho_0 = 0.001$	$\rho_0 = 0.003$	$\rho_0 = 0.006$
$\tau = 10^{-3}s$	4.47×10^{-4}	2.45×10^{-4}	1.23×10^{-4}	5.25×10^{-4}	1.82×10^{-3}
$\tau = 10^{-4}s$	3.18×10^{-4}	1.30×10^{-4}	3.57×10^{-5}	1.19×10^{-4}	5.40×10^{-4}
$\tau = 10^{-5}s$	5.38×10^{-5}	2.15×10^{-5}	5.29×10^{-6}	1.56×10^{-5}	6.73×10^{-5}
$\tau = 10^{-6}s$	5.73×10^{-6}	2.29×10^{-6}	5.56×10^{-7}	1.62×10^{-6}	6.90×10^{-6}

Dentre os valores dos parâmetros utilizados para calcular as soluções, o maior erro relativo máximo é menor que 0.2%. Pode-se perceber uma tendência do aumento do erro com o aumento do módulo da reatividade e com o aumento do tempo de relaxação. Na figura 6.2, pode-se ver como o erro relativo varia ao longo do tempo para os casos de maior e menor erro da tabela 6.6:

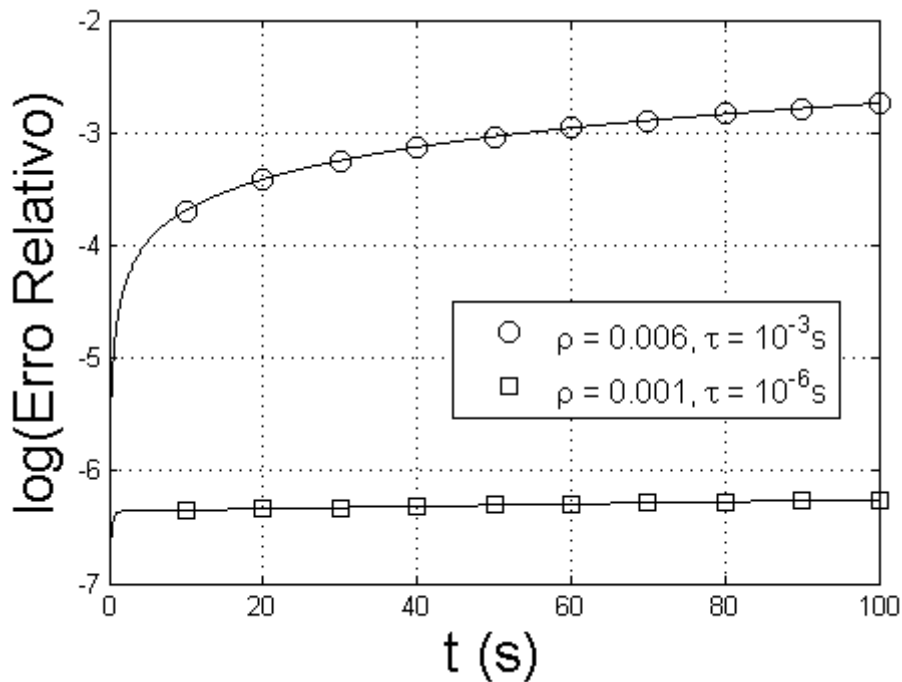


Figura 6.2: Variação do erro relativo ao longo do tempo para reatividade constante com 1 grupo de precursores

6.3 Resultados para Reatividade Constante com 6 Grupos de Precursores

Nesta seção são apresentados os resultados das equações da cinética pontual para cada modelo, considerando uma reatividade constante e 6 grupos de precursores. Foram utilizados os métodos de solução apresentados na seção 4.4 e tomando $\alpha = 0$.

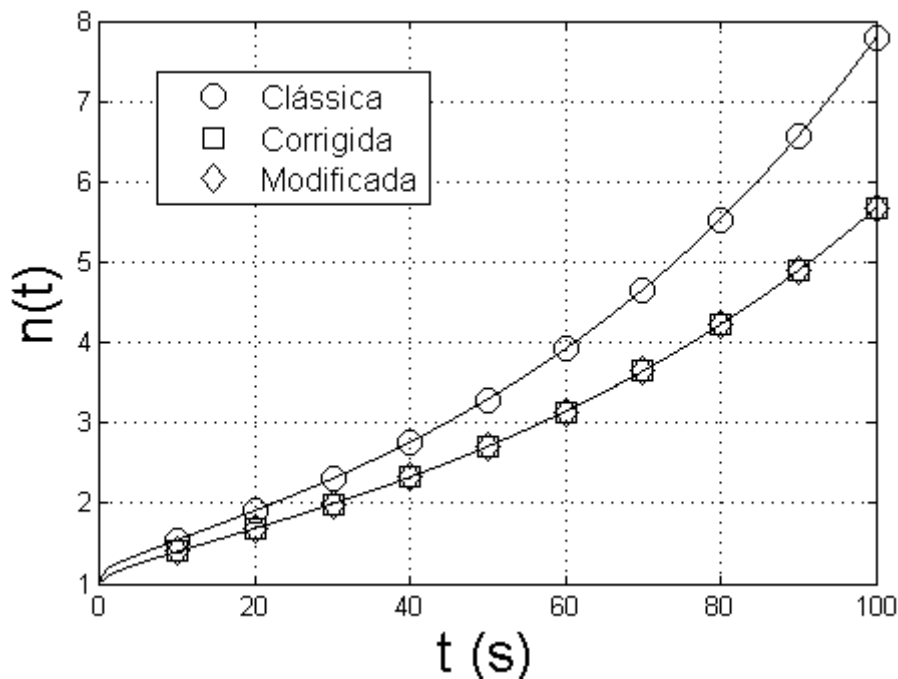


Figura 6.3: Solução dos diferentes modelos para reatividade constante com 6 grupos de precursores, com $\rho_0 = 0.001$ e $\tau = 10^{-3}s$

Novamente, na figura 6.3 os gráficos das soluções para as cinéticas modificada e corrigida estão quase sobrepostas, sendo assim mais útil analisar o erro relativo máximo.

Tabela 6.7: Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade constante com 6 grupos de precursores, variando ρ_0 e τ , com $0s < t < 100s$

	$\rho_0 = -0.006$	$\rho_0 = -0.003$	$\rho_0 = 0.001$	$\rho_0 = 0.003$	$\rho_0 = 0.006$
$\tau = 10^{-3}s$	1.40×10^{-4}	8.39×10^{-5}	2.09×10^{-4}	1.44×10^{-3}	4.50×10^{-3}
$\tau = 10^{-4}s$	9.09×10^{-5}	3.98×10^{-5}	3.02×10^{-5}	3.22×10^{-4}	1.30×10^{-3}
$\tau = 10^{-5}s$	1.54×10^{-5}	6.67×10^{-6}	3.18×10^{-6}	3.62×10^{-5}	1.45×10^{-4}
$\tau = 10^{-6}s$	1.64×10^{-6}	7.10×10^{-7}	3.19×10^{-7}	3.67×10^{-6}	1.46×10^{-5}

Dentre os valores dos parâmetros utilizados para calcular as soluções, o maior erro relativo máximo é menor que 0.5%. Pode-se perceber uma tendência do aumento do erro com o aumento do módulo da reatividade e com o aumento do tempo de relaxação. Na figura 6.4, pode-se ver como o erro relativo varia ao longo do tempo para os casos de maior e menor erro da tabela 6.7:

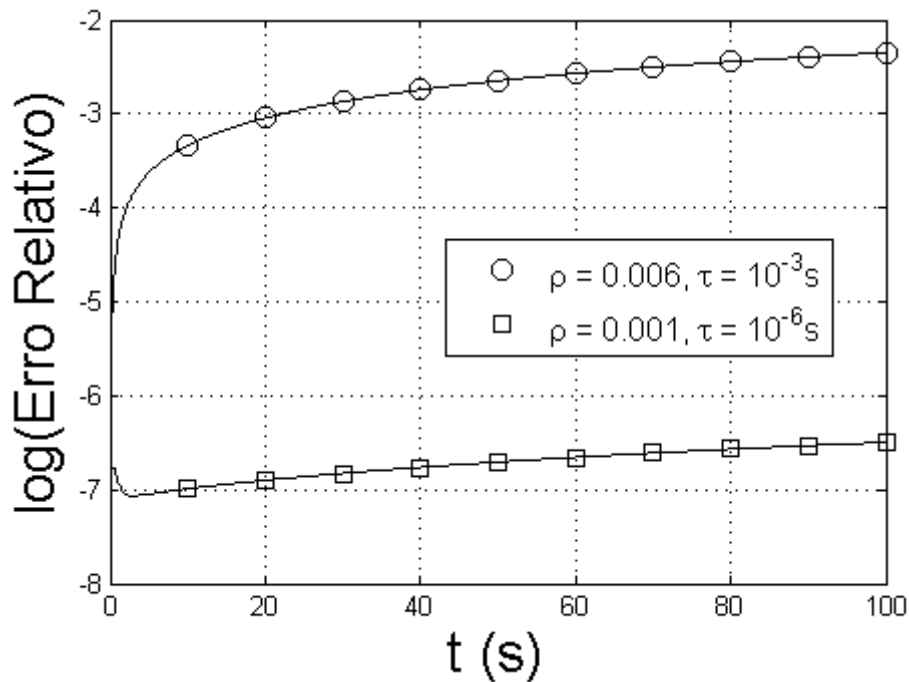


Figura 6.4: Variação do erro relativo ao longo do tempo para reatividade constante com 6 grupos de precursores

6.4 Resultados para Reatividade Linear com 1 Grupo de Precursores

Nesta seção são apresentados os resultados das equações da cinética pontual para cada modelo, considerando reatividade linear com o tempo e apenas 1 grupo de precursores. Foram utilizados os métodos de solução apresentados na seção 4.3.

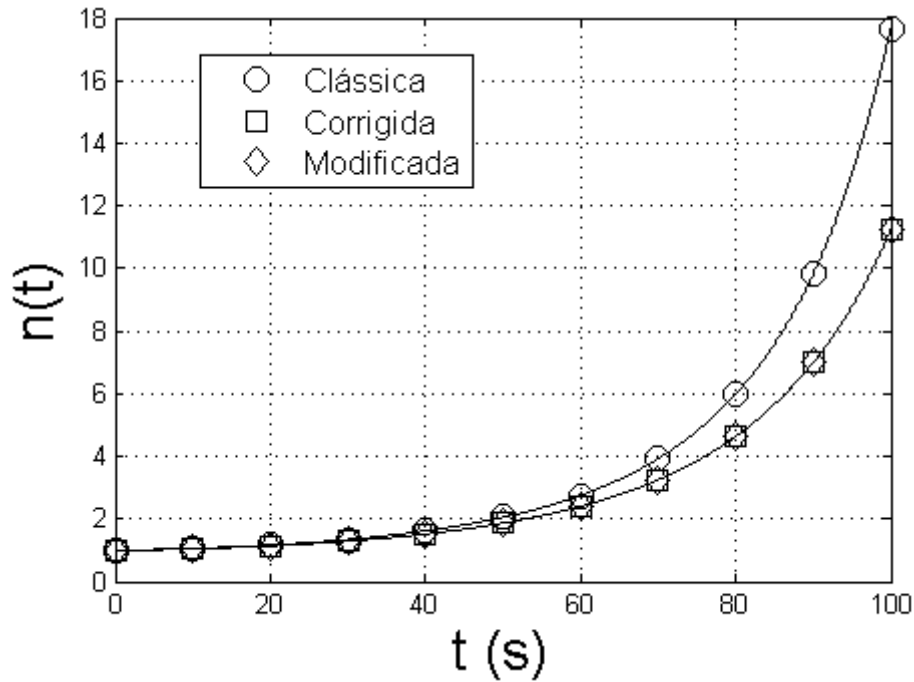


Figura 6.5: Solução para cada modelo para reatividade linear com 1 grupo de precursores, com $\rho_0 = 0$, $\tau = 10^{-3}s$ e $\alpha = 3.0 \times 10^{-5}s^{-1}$

A figura 6.5 mostra os gráficos das soluções de cada modelo. Como agora há um parâmetro a mais, a taxa de variação de reatividade α , e já foi visto que o erro tende a crescer com o aumento do tempo relaxação, pode-se considerar apenas o maior tempo de relaxação, para considerar o pior caso. A tabela será feita variando apenas α , da seguinte forma:

$$\alpha = \frac{\rho_f - \rho_0}{100} \quad (6.3)$$

A reatividade ao final de 100 segundos (ρ_f) será fixada em 0.006 (no qual o erro foi o maior nos casos anteriores) e as reatividades iniciais (ρ_0) escolhidas serão as mesmas das tabelas anteriores.

Tabela 6.8: Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade linear com 1 grupo de precursores, com $\tau = 10^{-3}s$ e variando α , com $0s < t < 100s$

$\alpha (s^{-1})$	1.20×10^{-4}	9.00×10^{-5}	5.00×10^{-5}	3.00×10^{-5}
Erro Máximo	2.33×10^{-4}	3.67×10^{-4}	7.10×10^{-4}	1.00×10^{-3}

O erro relativo máximo é $\leq 0.1\%$. Na figura 6.6, pode-se ver como o erro relativo varia ao longo do tempo para os casos de maior e menor erro da tabela 6.8:

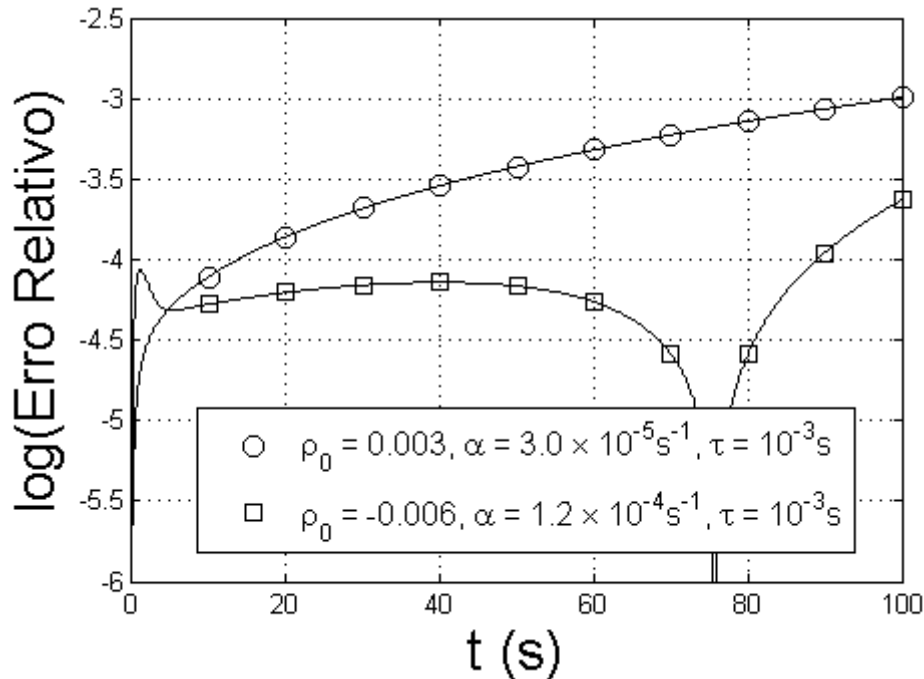


Figura 6.6: Variação do erro relativo ao longo do tempo para reatividade linear com 1 grupo de precursores

6.5 Resultados para Reatividade Linear com 6 Grupos de Precursores

Nesta seção são apresentados os resultados das equações da cinética pontual para cada modelo, considerando reatividade linear com o tempo e 6 grupos de precursores. Foram utilizados os métodos de solução apresentados na seção 4.4.

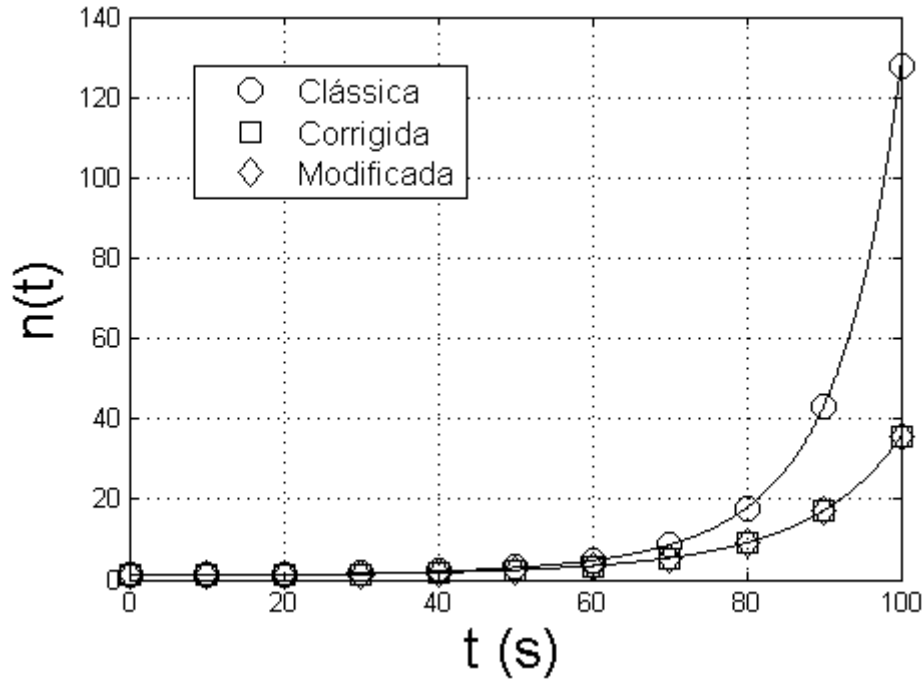


Figura 6.7: Solução dos diferentes modelos para reatividade linear com 6 grupos de precursores, com $\rho_0 = 0$, $\tau = 10^{-3}s$ e $\alpha = 3.0 \times 10^{-5}s^{-1}$

A figura 6.7 apresenta os gráficos da solução de cada modelo. A tabela com os erros será feita da mesma forma que para o caso de 1 grupo de precursores.

Tabela 6.9: Erro relativo máximo entre as soluções da cinética modificada e da cinética corrigida para reatividade linear com 6 grupos de precursores, com $\tau = 10^{-3}s$ e variando α , com $0s < t < 100s$

$\alpha (s^{-1})$	1.20×10^{-4}	9.00×10^{-5}	5.00×10^{-5}	3.00×10^{-5}
Erro Máximo	8.62×10^{-4}	1.14×10^{-3}	2.06×10^{-3}	2.95×10^{-3}

O erro relativo máximo continua baixo, sendo o maior deles em torno de 0.3%. Na figura 6.8, pode-se ver como o erro relativo varia ao longo do tempo para os casos de maior e menor erro da tabela 6.9:

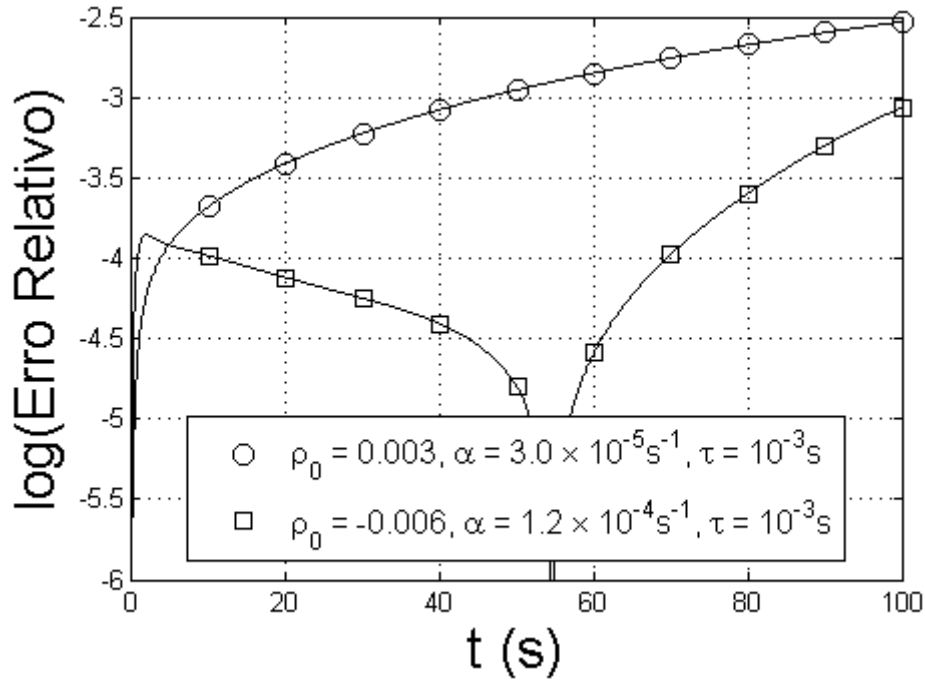


Figura 6.8: Variação do erro relativo ao longo do tempo para reatividade linear com 6 grupos de precursores

6.6 Resultados para a Cinética Inversa

Serão analisados os casos descritos no capítulo 5 para verificar a validade do modelo de cinética corrigida. Novamente, como os gráficos das soluções para cada modelo se sobrepõem, será mais útil apresentar os resultados em forma de tabela. Neste caso, o erro relativo máximo é dado por:

$$Erro = \max \left| \frac{\Delta\rho_{mod}(t) - \Delta\rho_{corr}(t)}{\Delta\rho_{mod}(t)} \right|, \quad (6.4)$$

onde $\Delta\rho_{mod}(t)$ e $\Delta\rho_{corr}(t)$ são dados pelas equações (5.16) e (5.17), respectivamente, no caso de potência exponencial, e pelas equações (5.19) e (5.20), respectivamente, no caso de potência linear.

6.6.1 Histórico de Potência Exponencial

A expressão para o erro relativo pode ser desenvolvida a partir das equações (5.16) e (5.17), além de usar a definição de Λ_c (3.10) para calcular $\Lambda_c - \Lambda$:

$$Erro\ Relativo = \frac{\tau \left\{ \Lambda\omega^2 + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i\beta_i\omega}{\omega+\lambda_i} [e^{-(\omega+\lambda_i)t} - 1] \right\}}{\tau \left(\frac{\Lambda}{l} - (1 - \beta) \right) \omega + \tau \left\{ \Lambda\omega^2 + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i\beta_i\omega}{\omega+\lambda_i} [e^{-(\omega+\lambda_i)t} - 1] \right\}} \quad (6.5)$$

$$Erro\ Relativo = \frac{\Lambda\omega + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i\beta_i}{\omega+\lambda_i} [e^{-(\omega+\lambda_i)t} - 1]}{\left(\frac{\Lambda}{l} - (1 - \beta) \right) + \Lambda\omega + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i\beta_i}{\omega+\lambda_i} [e^{-(\omega+\lambda_i)t} - 1]} \quad (6.6)$$

Como pode-se ver, na equação (6.6) a expressão para o erro relativo não depende de τ . Sendo assim, para este caso será variado apenas o parâmetro ω . Os valores usados para ω são os mesmos usados por PALMA *et. al* [14], acrescentados de mais um com uma ordem de grandeza menor ($\omega = 0.01s^{-1}$).

Tabela 6.10: Erro relativo máximo entre $\Delta\rho_{mod}(t)$ e $\Delta\rho_{corr}(t)$ para histórico de potência exponencial, com $0s < t < 100s$

$\omega(s^{-1})$	0.01	0.124	1.5	11.64
Erro Relativo	8.58×10^{-4}	5.26×10^{-4}	4.45×10^{-4}	3.16×10^{-3}

Pelos valores utilizados, não se vê uma relação entre a variação de ω e o erro, mas este sempre se mantém abaixo de 0.4%. Na figura 6.9, pode-se ver como o erro relativo varia ao longo do tempo para os casos de maior e menor erro da tabela 6.10. Nota-se que o erro é aproximadamente constante ao longo do tempo analisado.

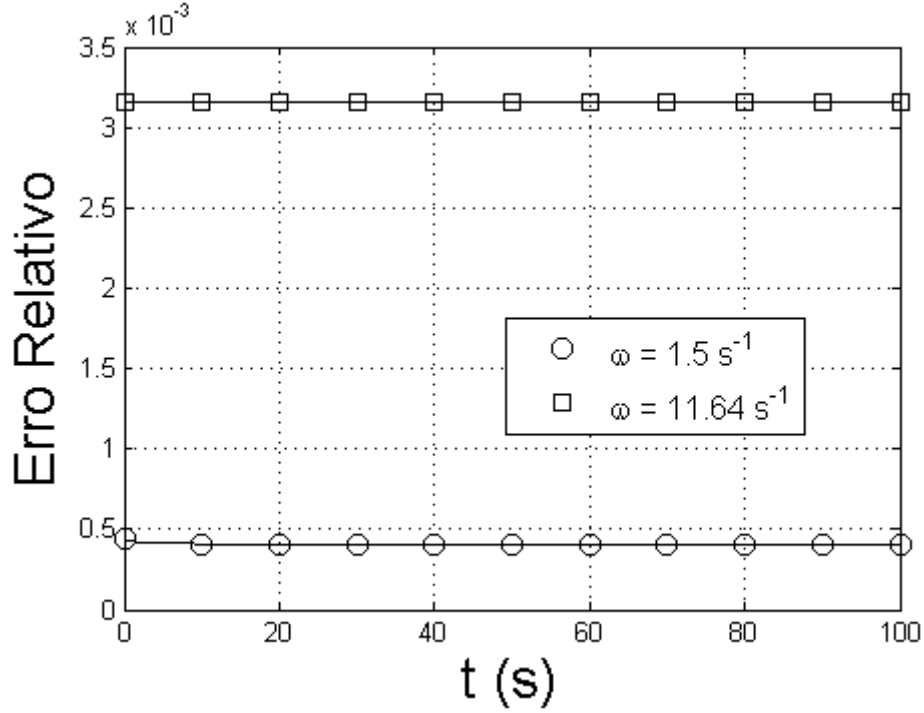


Figura 6.9: Variação do erro relativo ao longo do tempo para histórico de potência exponencial

6.6.2 Histórico de Potência Linear

A expressão para o erro relativo pode ser desenvolvida a partir das equações (5.19) e (5.20), além de usar a definição de Λ_c (3.10) para calcular $\Lambda_c - \Lambda$:

$$Erro\ Relativo = \frac{\tau \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_i \alpha}{n_0 + \alpha t} [e^{-\lambda_i t} - 1]}{\tau \left(\frac{\Lambda}{l} - (1 - \beta) \right) \frac{\alpha}{n_0 + \alpha t} + \tau \sum_{i=1}^6 \frac{\beta_i \alpha}{n_0 + \alpha t} [e^{-\lambda_i t} - 1]} \quad (6.7)$$

Novamente, τ se cancela no numerador e no denominador na equação (6.7) e a expressão para o erro relativo não depende desse parâmetro. Além disso, também pode ser cancelado o termo $\alpha/(n_0 + \alpha t)$, simplificando a expressão para:

$$Erro\ Relativo = \frac{\sum_{i=1}^6 \beta_i [e^{-\lambda_i t} - 1]}{(\Lambda/l - (1 - \beta)) + \sum_{i=1}^6 \beta_i [e^{-\lambda_i t} - 1]} \quad (6.8)$$

Neste caso, o erro relativo entre os modelos independe dos parâmetros τ e α . Assim, para os valores dos parâmetros dados nas tabelas 6.1 e 6.2, a seguinte figura mostra o comportamento do erro relativo em função do tempo:

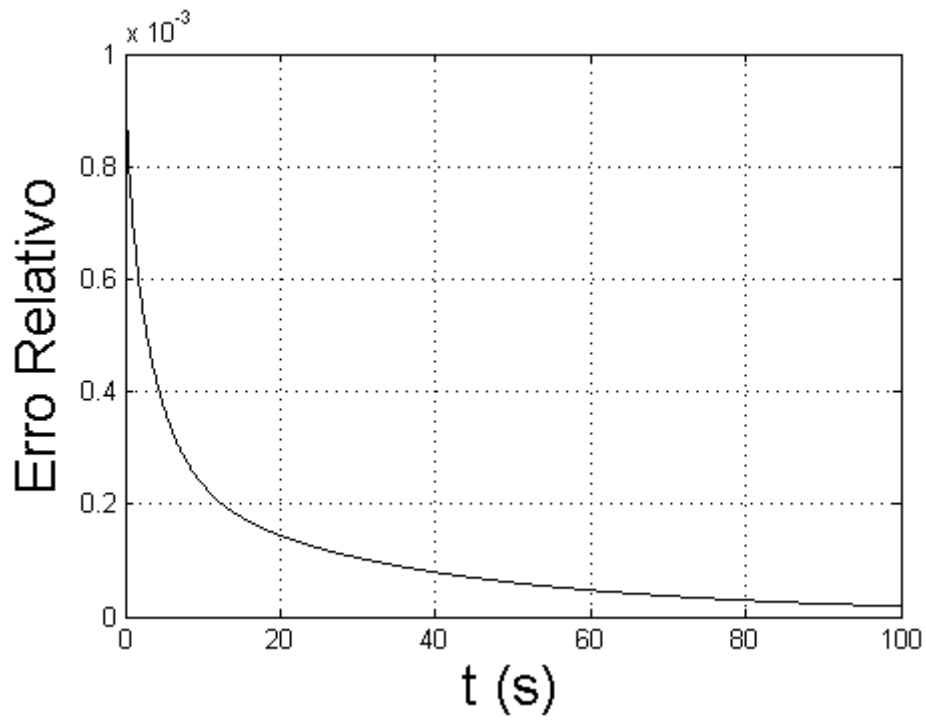


Figura 6.10: Variação do erro relativo ao longo do tempo para histórico de potência linear

Como pode-se ver, no caso de potência linear o erro relativo mantém-se sempre abaixo de 0.1%, tendendo a diminuir com o aumento do tempo.

Capítulo 7

Conclusões

O desenvolvimento e a relevância do modelo de cinética pontual modificada podem ser encontrados na literatura [1], [10], [14]. No entanto, ainda não haviam sido propostas possíveis aproximações para as equações resultantes. Como pode ser visto no capítulo 3, considerando os valores comuns dos parâmetros encontrados na literatura [1], [2], [10], [11], [14], [15], [16], podem ser feitas aproximações na equação para a densidade de nêutrons pela cinética modificada e obter uma equação com a mesma forma da cinética clássica.

No capítulo 6, os resultados apresentados mostram que o erro relativo máximo entre o modelo proposto (cinética corrigida) e o modelo de referência (cinética modificada), para os diversos casos analisados, mantém-se sempre da ordem de décimos de por cento ou menor, indicando que a aproximação feita sobre a cinética modificada é válida e a solução das equações são pouco alteradas. Além disso, nos gráficos comparando as soluções para os três modelos (clássica, modificada e corrigida), pode-se ver que o desvio entre a cinética corrigida e a modificada é ínfimo, como indicado pela sobreposição das curvas dessas soluções quando comparadas com a solução da cinética clássica.

Como a aproximação feita reduz em uma ordem o sistema de equações diferenciais, a cinética corrigida apresenta a vantagem de ser mais simples de ser resolvida, se comparada com a cinética modificada. Além disso, como o modelo proposto apenas ajusta o parâmetro de tempo médio de geração de nêutrons, os métodos analíticos e numéricos utilizados para se resolver as equações da cinética pontual clássica também podem ser usados para as equações da cinética corrigida, o que, em geral, não é verdade para a cinética modificada.

Outro ponto também analisado foi o método de solução para cada caso de reatividade no capítulo 4. Considerando os valores usuais para os problemas, foi possível realizar aproximações na solução analítica do caso de reatividade constante para 1 grupo de precursores, o que a tornou consideravelmente mais simples que a solução proposta por NUNES *et. al* [1]. Nos outros casos vistos, o método numérico utilizado possibilitou um passo temporal de até $10^{-3}s$, duas ordens de grandeza maior que o passo de $10^{-5}s$ do método numérico utilizado por NUNES [10], notando-se que os valores dos parâmetros utilizados nos dois trabalhos possuem a mesma ordem de grandeza.

Um trabalho futuro na linha do que foi estudado neste projeto seria a comparação das soluções do modelo proposto de cinética corrigida e da cinética modificada, porém levando em consideração os efeitos de realimentação termohidráulica no cálculo da potência nuclear.

Referências Bibliográficas

- [1] NUNES, A. L., MARTINEZ, A. S., SILVA, F. C. D., PALMA, D. A. P., “A New Formulation to the Point Kinetics Equations Considering the Time Variation of the Neutron Currents”, *World Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 5, pp. 57–71, 2015.
- [2] DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J., *Nuclear Reactor Analysis*. New York, John Wiley & Sons Ltd., 1976.
- [3] LAMARSH, J. R., BARATTA, A. J., *Introduction to Nuclear Engineering*. New Jersey, Prentice Hall, 2001.
- [4] LAMARSH, J. R., *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. New York, Addison-Wesley Publishing Company, 2002.
- [5] BELL, G. I., GLASSTONE, S., *Nuclear Reactor Theory*. New York, Van Nostrand Reinhold, 1970.
- [6] STACEY, W. M., *Nuclear Reactor Physics*. Weinheim, Wiley-VCH, 2007.
- [7] HENRY, A. F., *Nuclear-Reactor Analysis*. Cambridge, The MIT Press, 1975.
- [8] AKCASUH, Z., LELLOUCHE, G. S., SHOTKIN, L. M., *Mathematical Methods In Nuclear Reactor Dynamics*. New York and London, Academic Press, 1971.
- [9] HETRICK, D. L., *Dynamics of Nuclear Reactors*. Chicago, The University of Chicago Press, 1993.

- [10] NUNES, A. L., *A Influência da Aproximação Referente à Derivada da Corrente de Nêutrons nas Equações da Cinética Pontual*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, Abril de 2015.
- [11] ESPINOSA-PAREDES, G., POLO-LABARRIOS, M. A., ESPINOSA-MARTÍNEZ, E. G., *et al.*, “Fractional neutron point kinetics equations for nuclear reactor dynamics”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 38, pp. 307–330, 2011.
- [12] MOIN, P., *Fundamentals of Engineering Numerical Analysis*. New York, Cambridge University Press, 2010.
- [13] BURDEN, R. L., FAIRES, J. D., *Numerical Analysis*. Boston, Cengage Learning, 2010.
- [14] PALMA, D. A. P., NUNES, A. L., MARTINEZ, A. S., “Effect of the time variation of the neutron current density in the calculation of the reactivity”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 96, pp. 204–211, 2016.
- [15] GLASSTONE, S., SESONSKE, A., *Nuclear Reactor Engineering*. New York, Van Nostrand Reinhold, 1981.
- [16] KINARD, M., ALLEN, K. E. J., “Efficient numerical solution of the point kinetics equations in nuclear reactor dynamics”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 31, pp. 1039–1051, 2004.

Apêndice A

Desenvolvimento da Equação (2.22) do Capítulo 2

Como foi visto no capítulo 2, durante a dedução das equações da cinética pontual chega-se na equação (2.22). Os últimos dois termos dessa equação podem ser simplificados, mas com um desenvolvimento um pouco mais trabalhoso. Neste apêndice será feito esse desenvolvimento em mais detalhes. Relembrando a equação (2.22):

$$\begin{aligned}
& \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^* \frac{\partial}{\partial t} [(L - F_p)\phi] d^3r dE \\
& + \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} d^3r dE - \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \sum_{i=1}^6 \left(\lambda_i \phi^* \chi_i \frac{\partial C_i}{\partial t} \right) d^3r dE \\
& - \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \phi^* \chi_i C_i) d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \{ \phi F_0^+ \phi - \phi^* F_p \phi \} d^3r dE \\
& + \int_V \int_0^\infty \{ \phi^* [L(\cdot) - \nabla \cdot (D \nabla(\cdot))] \phi - \phi [L_0^+(\cdot) - \nabla \cdot (D_0 \nabla(\cdot))] \phi^* \} d^3r dE = 0
\end{aligned} \tag{A.1}$$

Para simplificar essa equação e chegar na equação (2.23), deve-se analisar os dois últimos termos separadamente:

$$I = \int_V \int_0^\infty \{ \phi F_0^+ \phi^* - \phi^* F_p \phi \} d^3r dE \tag{A.2a}$$

$$II = \int_V \int_0^\infty \{ \phi^* [L(\cdot) - \nabla \cdot (D \nabla(\cdot))] \phi - \phi [L_0^+(\cdot) - \nabla \cdot (D_0 \nabla(\cdot))] \phi^* \} d^3r dE \tag{A.2b}$$

Na equação (A.2a), é somado e subtraído o termo $\int_V \int_0^\infty \phi^* \sum_{i=1}^6 (F_i \phi) d^3r dE$:

$$I = \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi F_0^+ \phi^* - \phi^* F_p \phi - \phi^* \sum_{i=1}^6 (F_i \phi) + \phi^* \sum_{i=1}^6 (F_i \phi) \right\} d^3r dE \tag{A.3}$$

Utilizando as expressões explícitas de F_p (2.7b), F_i (2.7c) e F_0 (2.17b), a equação (A.3) fica:

$$\begin{aligned}
I &= \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \nu(E) \Sigma_f(\mathbf{r}, E, t_0) \chi(E') \phi^*(\mathbf{r}, E', t_0) d^3r dE dE' \\
&\quad - \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) d^3r dE dE' \\
&\quad + \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\phi^* F_i \phi) d^3r dE
\end{aligned} \tag{A.4}$$

onde:

$$\chi(E) \equiv (1 - \beta) \chi_f(E) + \sum_{i=1}^6 \beta_i \chi_i(E) \tag{A.5}$$

No primeiro termo, E e E' são variáveis de integração. Trocando E por E' e E' por E :

$$\begin{aligned}
I &= \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E', t) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t_0) \chi(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) d^3r dE dE' \\
&\quad - \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \phi(\mathbf{r}, E', t) d^3r dE dE' \\
&\quad + \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\phi^* F_i \phi) d^3r dE
\end{aligned} \tag{A.6}$$

que, em termos dos operadores F_p , F_i e F_0 , fica:

$$I = \int_V \int_0^\infty \left[\phi^*(F_0 - F) \phi + \sum_{i=1}^6 (\phi^* F_i \phi) \right] d^3r dE \tag{A.7}$$

onde:

$$F(\cdot) \equiv F_p(\cdot) + \sum_{i=1}^6 F_i(\cdot) \tag{A.8}$$

Desenvolvendo, agora, o termo II da equação (A.2b) com a expressão dos operadores L (2.7a) e L_0^+ (2.19a):

$$\begin{aligned}
II &= \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi^* \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) \phi - \phi \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) \phi^* - \phi^* \left[\int_0^\infty \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t)(\cdot) dE' \right] \phi \right. \\
&\quad \left. + \phi \left[\int_0^\infty \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E \rightarrow E', t_0)(\cdot) dE' \right] \phi^* - \phi^* \nabla \cdot (D \nabla \phi) + \phi \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi^*) \right\} d^3r dE
\end{aligned} \tag{A.9}$$

Pode-se separar o termo II em 3 partes e analisá-las separadamente:

$$II = (i) + (ii) + (iii)$$

$$(i) = \int_V \int_0^\infty \phi^* \left[\Sigma_t(\mathbf{r}, E, t) - \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0) \right] \phi d^3r dE \quad (\text{A.10a})$$

$$(ii) = \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi(\mathbf{r}, E, t) \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E \rightarrow E', t_0) \phi^*(\mathbf{r}, E', t_0) d^3r dE dE' \\ - \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\mathbf{r}, E', t) d^3r dE dE' \quad (\text{A.10b})$$

$$(iii) = \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi^*) - \phi^* \nabla \cdot (D \nabla \phi) \right\} d^3r dE \quad (\text{A.10c})$$

A expressão para (i) já está simplificada. Na expressão para (ii), E e E' são variáveis de integração, sendo assim permitido permutar uma pela outra no primeiro termo de (ii) e obter:

$$(ii) = \int_V \int_0^\infty \phi^* \left\{ \int_0^\infty \left[\Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0) - \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \right] (\cdot) dE' \right\} \phi d^3r dE \quad (\text{A.11})$$

Na expressão para (iii), o termo $\int_V \int_0^\infty \phi^* \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi) d^3r dE$ é adicionado e subtraído :

$$(iii) = \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi^*) - \phi^* \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi) \right\} d^3r dE \\ + \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi^* \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi) - \phi^* \nabla \cdot (D \nabla \phi) \right\} d^3r dE$$

Analisando a primeira integral de (iii):

$$\int_V \int_0^\infty \left\{ \phi \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi^*) - \phi^* \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi) \right\} d^3r dE \\ = \int_V \int_0^\infty \left\{ \nabla \cdot (\phi D_0 \nabla \phi^*) - D_0 \nabla \phi \cdot \nabla \phi^* - \nabla \cdot (\phi^* D_0 \nabla \phi) + D_0 \nabla \phi^* \cdot \nabla \phi \right\} d^3r dE \\ = \int_V \int_0^\infty \left\{ \nabla \cdot (\phi D_0 \nabla \phi^*) - \nabla \cdot (\phi^* D_0 \nabla \phi) \right\} d^3r dE \\ = \int_V \int_0^\infty \nabla \cdot \left\{ D_0 (\phi \nabla \phi^* - \phi^* \nabla \phi) \right\} d^3r dE$$

Usando o teorema de Gauss:

$$\int_V \int_0^\infty \nabla \cdot \left\{ D(\mathbf{r}, E, t) \left[\phi(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) - \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) \right] \right\} d^3r dE \\ = \int_{\partial V} \int_0^\infty D(\mathbf{r}_s, E, t) \left[\phi(\mathbf{r}_s, E, t) \nabla \phi^*(\mathbf{r}_s, E, t_0) - \phi^*(\mathbf{r}_s, E, t_0) \nabla \phi(\mathbf{r}_s, E, t) \right] \cdot \mathbf{dS} dE$$

onde \mathbf{r}_s representa a superfície do volume analisado. Como as condições de contorno são do tipo vácuo ($\phi(\mathbf{r}_s, E, t) = \phi^*(\mathbf{r}_s, E, t_0) = 0$), essa integral de superfície se anula. Assim, a expressão para (iii) fica:

$$\begin{aligned} (iii) &= \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi^* \nabla \cdot (D_0 \nabla \phi) - \phi^* \nabla \cdot (D \nabla \phi) \right\} d^3r dE \\ (iii) &= \int_V \int_0^\infty \phi^* \left\{ \nabla \cdot (D_0 \nabla(\cdot)) - \nabla \cdot (D \nabla(\cdot)) \right\} \phi d^3r dE \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Relembrando o operador L , pode-se definir o operador A , junto com seus respectivos operadores no caso estacionário, L_0 e A_0 :

$$\begin{aligned} L(\cdot) &\equiv \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t)(\cdot) - \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t)(\cdot) dE' \\ A(\cdot) &\equiv L(\cdot) - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t) \nabla(\cdot)) \end{aligned} \quad (\text{A.13a})$$

$$\begin{aligned} L_0(\cdot) &\equiv \Sigma_t(\mathbf{r}, E, t_0)(\cdot) - \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0)(\cdot) dE' \\ A_0(\cdot) &\equiv L_0(\cdot) - \nabla \cdot (D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla(\cdot)) \end{aligned} \quad (\text{A.13b})$$

A expressão para II da equação (A.2b), em termos dos operadores recém definidos, fica:

$$II = \int_V \int_0^\infty \phi^* (A - A_0) \phi d^3r dE \quad (\text{A.14})$$

Substituindo as expressões de I (A.7) e de II (A.14) na equação (A.1), chega-se na equação (2.23):

$$\begin{aligned} &\int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^* \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^* \frac{\partial}{\partial t} \left[(L - F_p) \phi \right] d^3r dE \\ &+ \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^* \frac{\partial \phi}{\partial t} d^3r dE = \int_V \int_0^\infty \phi^* \left[(F - F_0) - (A - A_0) \right] \phi d^3r dE \\ &- \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\phi^* F_i \phi) d^3r dE + \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \sum_{i=1}^6 \left[\lambda_i \frac{\partial}{\partial t} (\chi_i \phi^* C_i) \right] d^3r dE \\ &+ \int_V \int_0^\infty \sum_{i=1}^6 (\lambda_i \chi_i \phi^* C_i) d^3r dE \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$