



Universidade Federal
do Rio de Janeiro
Escola Politécnica

MODELO EMPÍRICO PARA AJUSTE DO TEMPO MÉDIO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA PONTUAL CLÁSSICA

David Araujo Barbosa Vasconcelos de Goes

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
Aquilino Senra Martinez

Rio de Janeiro
22 de Fevereiro de 2017

MODELO EMPÍRICO PARA AJUSTE DO TEMPO MÉDIO DAS EQUAÇÕES DE
CINÉTICA PONTUAL CLÁSSICA

David Araujo Barbosa Vasconcelos de Goes

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

Prof. Zelmo Rodrigues de Lima (IEN), D. Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

22 DE FEVEREIRO de 2017

Goes, David Araujo Barbosa Vasconcelos de

Modelo Empírico para Ajuste do Tempo Médio das Equações de Cinética Pontual Clássica. / David Araujo Barbosa Vasconcelos de Goes – Rio de Janeiro: UFRJ / ESCOLA POLITÉCNICA, 2017.

VII, 31 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves; Aquilino Senra Martinez.

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

Referências Bibliográficas: p. 31

1. Equação de Cinética Pontual. 2. Lei de Fick.
3. Método da Diferenças Finitas. 4. Física de Reatores.
I. Gonçalves, Alessandro da Cruz. II. Martinez, Aquilino Senra. III. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola Politécnica, Curso de Engenharia Nuclear. III. Modelo Empírico para Ajuste do Tempo Médio das Equações de Cinética Pontual.

Agradecimentos

Agradeço a Deus pelo dom da vida e pela força que me proporciona para conseguir tornar meus sonhos realidade.

Agradeço aos meus pais, Selma e Ivan, por estarem ao meu lado nas vitórias e por me apoiarem nos tropeços. Às minhas irmãs, Caroline e Catharina, por me aconselharem com a sabedoria de quem viveu há pouco tempo o que passo hoje.

Aos meus avós, Simplício, Maricota, Armando e Irma, por terem criado meus pais com muito amor e união e por me mostrarem que não precisa de muito para se ter uma vida boa e feliz.

Agradeço aos professores do Departamento de Engenharia Nuclear que trataram seus alunos com respeito, se importando com o conhecimento a ser passado e que não deixaram de medir esforços para criar um ambiente agradável à todos.

Ao meu orientador Alessandro da Cruz Gonçalves pela paciência, pela dedicação que tem com seus alunos e por todo apoio que me foi dado durante toda a graduação.

Ao professor Aquilino por contribuir com seu conhecimento para que este trabalho fosse feito e por toda a ajuda nesta reta final do curso.

Agradeço aos secretários, secretárias e todos os servidores que se esforçam para criar um ambiente de harmonia e paz para os alunos.

Aos amigos que estiveram ao meu lado em sala de aula na UFRJ e estavam mais próximos: Pedro Paulo, Thaís Maria, André Schechter, Rodrigo Diniz, Hugo Galvão, Carlos Sartin, Nathália Nunes, Felipe Porto, João Pedro, Rafael Komatsu, Fernanda Werner, Leandro Barbosa, Leandro Cardoso, Robson Júnior, Mateus Cunha, Ana Coppe, Douglas Santos, e a todos os demais integrantes do curso de Engenharia Nuclear que fizeram parte da minha vivência nesta faculdade.

Aos amigos que não deixaram de me apoiar: Matheus Moreto, Raphael Julio, Pedro Melo, Plínio Bernardo, Paulo Bernardo, Laís Barcelos, Thiago Saldanha, Filipe Casal, Oscar Martins, Jonas Rocha, Bruno Moreto, Lucas Figueiredo, Tito Faria, Jan Segre, Manuela Sena, Tamiris Leite, e tantos outros que sei que torcem por mim e eu torço por eles.

Por fim, agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPQ) pelo apoio financeiro ao projeto de iniciação científica que culminou neste projeto de final de curso.

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

MODELO EMPÍRICO PARA AJUSTE DO TEMPO MÉDIO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA PONTUAL CLÁSSICA

David Araujo Barbosa Vasconcelos de Goes

Fevereiro/2017

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves

Aquilino Senra Martinez

Curso: Engenharia Nuclear

As equações de cinética pontual são a forma mais simples de observar o comportamento temporal da produção de nêutrons em um reator. Tais equações são obtidas a partir da equação de transporte, utilizando a aproximação da Lei de Fick, conduzindo a um conjunto acoplado de equações diferenciais de primeira ordem, denominadas equações de cinética pontual. Neste trabalho busca-se rever a equação de cinética pontual clássica de modo a aproximá-la ao caso em que se considera a variação temporal da corrente de nêutrons. O método das diferenças finitas foi base para a criação da modelagem computacional utilizada por este projeto. São feitas comparações entre os resultados obtidos por este modelo e um de referência e, por fim, são gerados dados para o cálculo de um fator de ajuste empírico que modifica a equação de cinética pontual clássica de modo a aproximá-la ao caso real.

Palavras-chave: Equação de Cinética Pontual Clássica, Equação de Cinética Pontual, Modificada, Fator de Ajuste Empírico.

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

EMPIRIC MODEL FOR MEAN GENERATION TIME ADJUSTMENT FACTOR FOR
CLASSIC POINT REACTOR KINETICS EQUATIONS

David Araujo Barbosa Vasconcelos de Goes

February /2017

Advisors: Alessandro da Cruz Gonçalves

Aquilino Senra Martinez

Course: Nuclear Engineering

Point reactor kinetics equations are the easiest way to observe the neutron production time behavior in a nuclear reactor. These equations are derived from the neutron transport equation using an approximation called Fick's law leading to a set of first order differential equations. The main objective of this study is to review classic point kinetics equation in order to approximate its results to the case when it's considered the time variation of the neutron currents. The computational modeling used for the calculations is based on the finite difference method. The results obtained with this model are compared with the reference model and then it is determined an empirical adjustment factor that turns on to the point reactor kinetics equation to the real scenario.

Keywords: Classic Point Reactor Kinetics Equations, Modified Point Reactor Kinetics Equations, Empirical Adjustment Factor.

SUMÁRIO

1 - INTRODUÇÃO	1
2 – EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL MODIFICADA.....	2
2.1 A Lei de Fick	2
2.2 A Equação de Cinética Pontual Modificada.....	2
2.3 A Equivalência das Equações de Cinética Pontual Clássica e Modificada.....	10
3 – MÉTODO DE CÁLCULO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA PONTUAL	11
3.1 Método das Diferenças Finitas	11
3.2 Validação do Método de Cálculo das Equações de Cinética Pontual	13
4 – MÉTODO EMPÍRICO PARA AJUSTE DE Λ	17
4.1 Fundamentação Teórica do Método	17
4.2 Aplicação do Método.....	18
5 – FATOR DE AJUSTE ALFA.....	25
5.1 Curvas de Alfa.....	25
6 - CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS.....	30
BIBLIOGRAFIA.....	31

1 - INTRODUÇÃO

O objetivo deste trabalho é determinar de forma empírica um fator de correção para o parâmetro de tempo médio que modifique a equação de cinética pontual (clássica) de modo a aproximá-la da equação de cinética pontual modificada proposta por Nunes et. al.

O sistema de equações de cinética pontual descreve o comportamento da população de nêutrons do reator em relação ao tempo, assumindo que, durante os transientes normais de operação, tais como a inserção e retirada de barras de controle de maneira lenta e controlada, a forma espacial da distribuição neutrônica varie pouco, uma vez que dentro de um reator nuclear a distribuição dos nêutrons é conhecida. A forma espacial da distribuição de nêutrons pode variar significativamente quando o reator está sujeito a transientes abruptos, como no caso de fortes variações da reatividade, tais como inserção de barras de controle para desligamento ou adição de ácido bórico durante a operação.

O sistema de equações de cinética pontual modificado exige, para sua solução, métodos mais sofisticados que os exigidos pela cinética pontual clássica, portanto surge a necessidade de aperfeiçoar o modelo clássico sem perder qualidade nos resultados. A maneira a ser trabalhada será encontrar um fator de ajuste do tempo médio de geração que aproxime o sistema clássico do modificado.

No capítulo 2 serão mostrados os cálculos que levam da equação de difusão de nêutrons à equação de cinética pontual modificada e serão mostradas, também, as aproximações feitas para que se encontre a equação de cinética pontual clássica.

O capítulo 3 apresenta a aplicação do método de diferenças finitas nas equações de cinética pontual para um grupo de precursores e reatividade constante que serão utilizados para realizar a modelagem computacional e a comparação entre os resultados obtidos da modelagem computacional e os dados da literatura.

No capítulo 4 será apresentada a forma empírica para obtenção do fator α que aproxima os resultados da equação de cinética pontual clássica dos resultados da equação de cinética pontual modificada.

As conclusões serão feitas no capítulo 5 e a bibliografia é apresentada no capítulo seguinte.

2 – EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL MODIFICADA

2.1 A Lei de Fick

O transporte de nêutrons é bastante complicado em seu caso geral. Porém, será mostrado que para alguns parâmetros a corrente de nêutrons e o fluxo estão relacionados de uma maneira simples. Nesses casos, é possível obter soluções elementares para problemas de transporte (LAMARSH, 1983).

Os nêutrons se comportam de maneira similar à do soluto em solução, de modo que, caso haja uma maior concentração de nêutrons em uma região do reator, haverá um fluxo neutrônico para a região de menor densidade.

O fluxo é geralmente função das três variáveis espaciais, da energia e do tempo e usualmente é escrito desta maneira pela lei de Fick:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(\mathbf{r}, E, t)\nabla\phi(\mathbf{r}, E, t) \quad (1)$$

Tal que \mathbf{J} é igual ao vetor densidade de corrente de nêutrons e tem a mesma unidade do fluxo ϕ (nêutrons/cm² s). O parâmetro D é o coeficiente de difusão e é dado por:

$$D(\mathbf{r}, E, t) = 1/3 \sum_{tr} (\mathbf{r}, E, t) \quad (2)$$

Σ_{tr} é a seção de choque macroscópica de transporte.

2.2 A Equação de Cinética Pontual Modificada

A equação de transporte de nêutrons é um modelo geral conhecido para descrever o comportamento dos nêutrons dentro de um reator. Ela pode ser escrita em função do fluxo angular de nêutrons, $\varphi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t)$, pelas equações (3) e (5).

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t)}{\partial t} + L_1 \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i C_i(\mathbf{r}, t) + F_1 \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) \quad (3)$$

Em que χ_i é o espectro de fissão do grupo i , λ_i é a constante de decaimento do grupo i e C_i é a concentração de precursores de nêutrons retardados do grupo i , e:

$$\frac{1}{4\pi} \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = F_{i1} \varphi(\mathbf{r}, E', \widehat{\Omega}', t) - \frac{1}{4\pi} \lambda_i \chi_i(E) C_i(\mathbf{r}, t) \quad (4)$$

Em que $i = 1, 2, 3, \dots, 6$. e os operadores L_1 , F_1 , F_{p1} e F_{i1} são definidos como:

$$L_1(\cdot) \equiv \widehat{\Omega} \cdot \nabla(\cdot) + \sum_t(\mathbf{r}, E, t) - \int_{4\pi} \int_0^\infty \sum_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \widehat{\Omega}' \rightarrow \widehat{\Omega}, t) (\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' \quad (5)$$

$$F_1(\cdot) \equiv F_{p1}(\cdot) + \sum_{i=1}^6 F_{i1}(\cdot) \quad (6)$$

$$F_{p1}(\cdot) \equiv \frac{1}{4\pi} (1 - \beta) \chi_f(E) \int_{4\pi} \int_0^\infty v(E) \sum_f(\mathbf{r}, E', t) (\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' \quad (7)$$

Em que os diferentes \sum indicam as seções de choque macroscópicas de espalhamento (s), total (t) e fissão (f). E,

$$F_{i1}(\cdot) \equiv \frac{1}{4\pi} \beta_i \chi_i(E) \int_{4\pi} \int_0^\infty v(E) \sum_f(\mathbf{r}, E', t) (\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' \quad (8)$$

A seção de choque de espalhamento pode ser expandida em função dos polinômios de Legendre até o segundo termo. A expansão é feita para $l = 0$ e $l = 1$. É a aproximação de P_1 .

$$\sum_S (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \widehat{\Omega}' \rightarrow \widehat{\Omega}, t) \cong \sum_{l=0}^1 \frac{2l+1}{4\pi} \sum_{S_l} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) P_l(\widehat{\Omega}' \cdot \widehat{\Omega}) \quad (9)$$

A equação (5) pode ser reescrita como:

$$L_1(\cdot) \equiv \widehat{\Omega} \cdot \nabla(\cdot) + \sum_t (\mathbf{r}, E, t) - \int \int_0^\infty \frac{1}{4\pi} \sum_{S_0} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) (\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' - \int \int_0^\infty \frac{3}{4\pi} \sum_{S_1} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \widehat{\Omega}' \cdot \widehat{\Omega} (\cdot) dE' d\widehat{\Omega}' \quad (10)$$

Aplicando o operador $\int_{4\pi}(\cdot) d\widehat{\Omega}$ às equações (3) e (4) e levando em conta as seguintes definições:

$$\phi(\mathbf{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) d\widehat{\Omega} \quad (11)$$

$$J(\mathbf{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \varphi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t) \widehat{\Omega} d\widehat{\Omega} \quad (12)$$

Tem-se que:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, E, \widehat{\Omega}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot J(\mathbf{r}, E, t) + L\phi(\mathbf{r}, E, t) = F\phi(\mathbf{r}, E, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\mathbf{r}, t) - \sum_{i=1}^6 F_i \phi(\mathbf{r}, E, t) \quad (13)$$

$$\chi_i(E) \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = F_i \phi(\mathbf{r}, E, t) - \lambda_i \chi_i(E) C_i(\mathbf{r}, t) \quad (14)$$

De modo que os operadores L , F e F_i são:

$$L(\cdot) \equiv \sum_t (\mathbf{r}, E, t) - \int_0^\infty \sum_{s_0} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) (\cdot) dE' \quad (15)$$

$$F(\cdot) \equiv \left\{ (1 - \beta)\chi_f(E) + \sum_{i=1}^6 \beta_i \chi_i(E) \right\} \int_0^\infty v(E) \sum_f (\mathbf{r}, E', t) (\cdot) dE' \quad (16)$$

$$F_i(\cdot) \equiv \beta_i \chi_i(E) \int_0^\infty v(E) \sum_f (\mathbf{r}, E', t) (\cdot) dE' \quad (17)$$

Em que v é a velocidade dos nêutrons. Substituindo (10) em (3), multiplicando o resultado por Ω e integrando no ângulo sólido:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} + \frac{1}{3} \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) + \sum_t (\mathbf{r}, E, t) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = \\ = \int_0^\infty \sum_{s_1} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E', t) dE' \end{aligned} \quad (18)$$

Considerando a aproximação (DUDERSTADT, 1976):

$$\sum_{s_1} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \cong \sum_{s_1} (\mathbf{r}, E', t) \delta(E' - E) \quad (19)$$

E definindo a seção de choque de transporte:

$$\sum_{tr} (\mathbf{r}, E, t) \equiv \sum_t (\mathbf{r}, E, t) - \sum_{s_1} (\mathbf{r}, E, t) \quad (20)$$

Da equação (18), tem-se:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} + \sum_t (\mathbf{r}, E, t) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -\frac{1}{3} \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t) \quad (21)$$

Dividindo a equação (21) pela seção de choque de transporte, utilizando a equação (2) e aplicando o operador divergente, obtém-se:

$$\frac{3D(\mathbf{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) - \nabla \cdot [D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t)] \quad (22)$$

Derivando a equação (13) em relação ao tempo, multiplicando por $\frac{3D(\mathbf{r}, E, t)}{v(E)}$, somando a própria equação (13), não derivada, e substituindo (22), tem-se que:

$$\begin{aligned} & \frac{3D(\mathbf{r}, E, t)}{(v(E))^2} \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t^2} - \nabla \cdot [D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t)] + \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} + L\phi(\mathbf{r}, E, t) \\ & \frac{3D(\mathbf{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \{(L - F)\phi(\mathbf{r}, E, t)\} = \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) \frac{3D(\mathbf{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + F\phi(\mathbf{r}, E, t) - \\ & \sum_{i=1}^6 \frac{3D(\mathbf{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} [F_i \phi(\mathbf{r}, E, t)] + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\mathbf{r}, t) - \sum_{i=1}^6 F_i \phi(\mathbf{r}, E, t) \end{aligned} \quad (23)$$

Quando o regime é estacionário, todos os diferenciais em função do tempo das equações (14) e (23) são desconsiderados, tal que:

$$-\nabla \cdot [D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t_0)] + (L_0 - F_0)\phi(\mathbf{r}, E, t_0) = 0 \quad (24)$$

Considerando o fluxo adjunto de nêutrons da equação anterior, tem-se:

$$-\nabla \cdot [D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0)] + (L_0^+ - F_0^+)\phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) = 0 \quad (25)$$

Tal que:

$$L_0^+(\cdot) \equiv \sum_t (\mathbf{r}, E, t) - \int_0^\infty \sum_{s_0} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0) (\cdot) dE' \quad (26)$$

$$\begin{aligned} F_0^+(\cdot) & \equiv (1 - \beta)v(E) \sum_f (\mathbf{r}, E, t_0) \int_0^\infty \chi_f(E') (\cdot) dE' + \\ & \sum_{i=1}^6 \beta_i v(E) \sum_f (\mathbf{r}, E, t_0) \int_0^\infty \chi_i(E') (\cdot) dE' \end{aligned} \quad (27)$$

$$L_0(\cdot) \equiv \sum_t (\mathbf{r}, E, t) - \int_0^\infty \sum_{s_0} (\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t_0) (\cdot) dE' \quad (28)$$

$$F_0(\cdot) \equiv (1 - \beta)\chi_f(E) \int_0^\infty v(E') \sum_f (\mathbf{r}, E', t_0) (\cdot) dE' + \sum_{i=1}^6 \beta_i \chi_i(E) \int_0^\infty v(E') \sum_f (\mathbf{r}, E', t_0) (\cdot) dE' \quad (29)$$

Multiplica-se a equação (24) pelo fluxo adjunto de nêutrons e integra-se em relação ao volume e a energia:

$$- \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla [D(\mathbf{r}, E, t_0) \nabla \phi(\mathbf{r}, E, t_0)] dE d^3r + \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) (L_0 - F_0) \phi(\mathbf{r}, E, t_0) dE d^3r = 0 \quad (30)$$

Fazendo o mesmo para a equação (23) e subtraindo a equação (30), encontra-se:

$$\begin{aligned} & \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t^2} dE d^3r - \\ & \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) (L_0 - F_0) \phi(\mathbf{r}, E, t_0) dE d^3r + \\ & \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} dE d^3r + \\ & \int_V \int_0^\infty \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) (L - F) \phi(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r + \\ & \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{\partial}{\partial t} \{(L - F) \phi(\mathbf{r}, E, t)\} dE d^3r = \\ & \sum_{i=1}^6 \int_V \int_0^\infty \lambda_i \chi_i(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{3D}{v} \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dE d^3r \\ & \sum_{i=1}^6 \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{\partial}{\partial t} [F_i \phi(\mathbf{r}, E, t)] dE d^3r + \end{aligned} \quad (31)$$

$$\sum_{i=1}^6 \int_V \int_0^{\infty} \lambda_i \chi_i(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) C_i(\mathbf{r}, t) dE d^3r -$$

$$\sum_{i=1}^6 \int_V \int_0^{\infty} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) F_i \phi(\mathbf{r}, E, t) dE d^3r$$

Para simplificar foram omitidas as dependências do coeficiente de difusão e da velocidade dos nêutrons. O fluxo de nêutrons pode ser escrito como o produto de um fator de amplitude $n(t)$, que é dependente exclusivamente do tempo, e de um fator de forma, dependente da posição e energia, $f(\mathbf{r}, E)$. Logo,

$$\phi(\mathbf{r}, E, t) \cong n(t) f(\mathbf{r}, E) \quad (32)$$

A ideia de escrever o fluxo de nêutrons dessa maneira é para mostrar que o fator de amplitude (densidade de nêutrons) deve descrever a variação no tempo enquanto o fator de forma pouco varia no tempo.

Definindo o termo de normalização I_F como:

$$I_F \equiv \int_V \int_0^{\infty} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \int_0^{\infty} \{(1 - \beta) \chi_P(E)\} v(E') \sum_f(\mathbf{r}, E', t) f(\mathbf{r}, E) dE' dE d^3r +$$

$$\int_V \int_0^{\infty} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \int_0^{\infty} \left\{ \sum_{i=1}^6 \beta_i \chi_i(E) \right\} v(E') \sum_f(\mathbf{r}, E', t) f(\mathbf{r}, E) dE' dE d^3r \quad (33)$$

Substituindo (32) em (31) e dividindo o resultado por (33), tem-se:

$$\frac{\Lambda}{f_D} \frac{d^2 n(t)}{dt^2} + \left(\Lambda + \frac{\Lambda f_A}{f_D} - \frac{(1 - \beta)}{f_D} \right) \frac{dn(t)}{dt} - (\rho - \beta)n(t) -$$

$$\Lambda \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) - \frac{\Lambda}{f_D} \sum_{i=1}^6 \lambda_i \frac{dC_i(t)}{dt} = 0 \quad (34)$$

Em que ρ é a reatividade, β é a fração de nêutrons retardados emitidos, f_D é a frequência de transporte de nêutrons e f_A é a frequência de absorção de nêutrons.

Foi considerado que a variação do coeficiente de difusão e das seções de choque em relação ao tempo é desprezável, o que implica que suas derivadas são nulas. Os parâmetros expostos em (34) são definidos como:

$$\Lambda \equiv \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) f(\mathbf{r}, E) dE d^3r \quad (35)$$

$$\frac{1}{f_D} \equiv \frac{1}{\Lambda I_F} \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v^2} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) f(\mathbf{r}, E) dE d^3r \quad (36)$$

$$\rho \equiv -\frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \frac{1}{v} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \{(F - F_0) - (L - L_0)\} f(\mathbf{r}, E) dE d^3r \quad (37)$$

$$\beta_i \equiv \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty F_i \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) f(\mathbf{r}, E) dE d^3r \quad (38)$$

$$\beta \equiv \sum_{i=1}^6 \beta_i \quad (39)$$

$$f_A \equiv \frac{1}{\Lambda} + \frac{f_D}{\Lambda I_F} \int_V \int_0^\infty \frac{3D}{v} \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \{(L - F) f(\mathbf{r}, E)\} dE d^3r - \frac{1}{\Lambda I_F} \sum_{i=1}^6 \int_V \int_0^\infty F_i \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) f(\mathbf{r}, E) dE d^3r \quad (40)$$

$$C_i(t) \equiv \frac{1}{\Lambda} \int_V \int_0^\infty \chi_i(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) C_i(\mathbf{r}, t) dE d^3r \quad (41)$$

Multiplicando a equação (14) pelo fluxo adjunto de nêutrons após usar a equação (32) e, em seguida, integrando em relação ao volume e a energia, tem-se:

$$\int_V \int_0^\infty \chi_i(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} dE d^3r = n(t) \int_V \int_0^\infty F_i \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) f(\mathbf{r}, E) dE d^3r - \quad (42)$$

$$\lambda_i \int_V \int_0^\infty \chi_i(E) \phi^*(\mathbf{r}, E, t_0) C_i(\mathbf{r}, t) dE d^3r$$

Dividindo (42) por ΛI_F e usando (38) e (41) obtém-se:

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = -\lambda C_i(t) + \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t), \quad i = 1, 2, 3 \dots, 6 \quad (43)$$

As equações (34) e (43) formam o modelo de cinética pontual modificada (NUNES, 2015)

2.3 A Equivalência das Equações de Cinética Pontual Clássica e Modificada

A equação de cinética pontual clássica é obtida a partir da aproximação da Lei de Fick (2) do mesmo modo que a equação de cinética pontual modificada foi obtida. A diferença é que os termos de segunda ordem não aparecem na equação clássica.

Observando a equação (34) pode-se notar que quando $\frac{1}{f_D}$ tende a zero, ela resulta na equação de cinética pontual clássica:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho(t) - \beta)}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (44)$$

Considerando um meio homogêneo, a equação (36) pode ser simplificada. O coeficiente de difusão e a velocidade são considerados constantes, então, substituindo (35) em (36), tem-se que:

$$\frac{1}{f_D} \equiv \frac{3D}{v} \quad (45)$$

Logo,

$$f_D = \frac{v}{3D} \quad (46)$$

3 – MÉTODO DE CÁLCULO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA PONTUAL

3.1 Método das Diferenças Finitas

A aproximação de derivadas por diferenças finitas é de grande importância para a solução de equações diferenciais, no caso um problema de valor inicial. Nesta seção será resolvida a equação diferencial de cinética pontual sem aproximação relacionada à densidade da corrente de nêutrons, para um grupo de precursores e com reatividade constante, pelo método numérico das diferenças finitas. Serão utilizadas as seguintes aproximações para o cálculo numérico da primeira e segunda derivadas (RUGGIERO, 1998):

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{f_{t+\Delta t} - f_t}{\Delta t} \quad (47)$$

$$\frac{d^2f(t)}{dt^2} = \frac{f_{t+2\Delta t} - 2f_{t+\Delta t} + f_t}{\Delta t^2} \quad (48)$$

Reescrevendo a equação (34) para um grupo de precursores e reatividade constante:

$$\frac{1}{f_D} \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda}\right) \frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) + \frac{\lambda}{f_D} \frac{dC(t)}{dt} \quad (49)$$

E a expressão da concentração dos precursores de nêutrons que vem da equação (43) é:

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\lambda C(t) + \frac{\beta}{\Lambda} n(t) \quad (50)$$

Aplicando (47) em (50) tem-se a aproximação explícita:

$$C_{t+\Delta t} = (1 - \lambda\Delta t)C_t + \Delta t \frac{\beta}{\Lambda} n_t \quad (51)$$

As condições iniciais são tais que:

$$n(0) = n_0 \quad (52)$$

$$\left. \frac{dC(t)}{dt} \right|_{t=0} = 0 \quad (53)$$

$$C_0 = \frac{\beta}{\lambda \Lambda} n_0 \quad (54)$$

$$\left. \frac{dn(t)}{dt} \right|_{t=0} = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \quad (55)$$

Aplicando (47) em (72) encontra-se o último valor inicial necessário:

$$n_{\Delta t} = \left(\frac{\Delta t \rho_0}{\Lambda} + 1 \right) n_0 \quad (56)$$

Substituindo (50) em (49) e aplicando (48) e (47) obtém-se a expressão de aproximação explícita:

$$\begin{aligned} n_{t+2\Delta t} = & \left[2 - \Delta t f_D \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \right] n_{t+\Delta t} + \\ & \left[\Delta t f_D \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) + f_D \Delta t^2 \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} - 1 \right] n_t + \\ & \Delta t \lambda C_{t+\Delta t} + \lambda \Delta t f_D C_t \left(\Delta t - \frac{1}{f_D} \right) \end{aligned} \quad (57)$$

As equações (51) e (57) são a base para o cálculo da equação de cinética pontual modificada na modelagem computacional. Aplicando a equação (47), do método de diferenças finitas, na equação de cinética pontual clássica (44), tem-se a seguinte aproximação explícita:

$$n_{t+\Delta t} = \left(1 + \Delta t \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda}\right) n_t + \lambda \Delta t C_t \quad (58)$$

As equações (51) e (58) são a base para o cálculo da equação de cinética pontual modificada na modelagem computacional.

O método de diferenças finitas foi utilizado por ser um método conhecido e de fácil aplicação mas outro método de aproximação poderia ter sido escolhido.

3.2 Validação do Método de Cálculo das Equações de Cinética Pontual

A partir das equações (58), (57) e (51) e das condições iniciais (56), (54) e (52), foi elaborada uma modelagem computacional para os cálculos da densidade de nêutrons baseado no método de diferenças finitas com objetivo de validar o método numérico de cálculo. Para validá-la, tomaram-se como base os parâmetros cinéticos utilizados por NUNES (2015), bem como os resultados obtidos por ele. As tabelas abaixo mostram os parâmetros e a comparação entre os resultados obtidos neste trabalho com os da literatura para as equações de cinética pontual clássica e modificada. Lembrando que as equações utilizadas são para o caso com reatividade constante e apenas um precursor.

Tabela 1 – Parâmetros utilizados para os cálculos

Parâmetro	Símbolo	Valores
Constante de Decaimento	λ	0.0810958 s^{-1}
Tempo de geração médio	Λ	0.002 s
Fração de Nêutrons Lentos	β	0.007
Frequência de Absorção de Nêutrons	f_A	4167 s^{-1}
Frequência de Transporte de Nêutrons	f_D	$10^3 \text{ s}^{-1} / 10^4 \text{ s}^{-1}$
Densidade de nêutrons	n_0	1 cm^{-3}
Intervalo de tempo	Δt	10^{-5} s

Tabela 2 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os diferentes métodos de cinética pontual para um $\rho=0.001$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^4 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Clássica (Modelagem)	Modificada (NUNES)	Modificada (Modelagem)
0.4	1.1173	1.11732	1.0979	1.09793
1	1.1648	1.16485	1.1528	1.15279
10	1.3186	1.31865	1.3129	1.31288
20	1.5033	1.50329	1.4946	1.49456
40	1.9537	1.95374	1.9368	1.93681
100	4.2888	4.28884	4.2151	4.21512

Tabela 3 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os diferentes métodos de cinética pontual para um $\rho=0.001$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^3 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Clássica (Modelagem)	Modificada (NUNES)	Modificada (Modelagem)
0.4	1.1173	1.11732	1.0379	1.03789
1	1.1648	1.16485	1.0798	1.07982
10	1.3186	1.31865	1.2688	1.26877
20	1.5033	1.50329	1.4279	1.42790
40	1.9537	1.95374	1.8083	1.80829
100	4.2888	4.28884	3.6727	3.67269

Tabela 4 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os diferentes métodos de cinética pontual para um $\rho=0.003$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^4 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Clássica (Modelagem)	Modificada (NUNES)	Modificada (Modelagem)
0.4	1.4161	1.41608	1.3341	1.33411
1	1.6770	1.67701	1.5954	1.59540
10	2.9278	2.92784	2.8417	2.84162
20	5.1718	5.17183	4.9561	4.95609
40	16.138	16.13762	15.076	15.07602
100	490.25	490.25741	424.36	424.35479

Tabela 5 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os diferentes métodos de cinética pontual para um $\rho=0.003$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^3 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Clássica (Modelagem)	Modificada (NUNES)	Modificada (Modelagem)
0.4	1.4161	1.41608	1.1185	1.11848
1	1.6770	1.67701	1.2640	1.26403
10	2.9278	2.92784	2.3225	2.32252
20	5.1718	5.17183	3.7127	3.71271
40	16.138	16.13762	9.4734	9.47337
100	490.25	490.25741	157.38	157.37672

Tabela 6 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os diferentes métodos de cinética pontual para um $\rho=0.006$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^4 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Clássica (Modelagem)	Modificada (NUNES)	Modificada (Modelagem)
0.4	2.0958	2.09580	1.8212	1.82116
1	3.4712	3.47125	2.9008	2.90082
10	56.554	56.55376	38.432	38.43172
20	947.92	947.92913	487.09	487.08774
40	2.663×10^5	2.663×10^5	78236	78235.88533
100	5.905×10^{12}	5.905×10^{12}	3.242×10^{11}	3.242×10^{11}

Tabela 7 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os diferentes métodos de cinética pontual para um $\rho=0.006$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^3 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Clássica (Modelagem)	Modificada (NUNES)	Modificada (Modelagem)
0.4	2.0958	2.09580	1.2524	1.25240
1	3.4712	3.47125	1.6157	1.61569
10	56.554	56.55376	9.1475	9.14749
20	947.92	947.92913	42.311	42.31118
40	2.663×10^5	2.663×10^5	898.86	898.85857
100	5.905×10^{12}	5.905×10^{12}	8.617×10^6	8.617×10^6

Pelos resultados mostrados nas Tabelas 1 à 7, pode-se verificar que a modelagem computacional para os cálculos da densidade de nêutrons baseado no método de diferenças finitas mostra-se de acordo com os resultados encontrados na literatura.

Após a validação da modelagem computacional, pode-se continuar com as análises para obtenção de um fator empírico α modificador da equação de cinética pontual clássica de modo a aproximá-la dos resultados da equação de cinética pontual modificada.

4 – MÉTODO EMPÍRICO PARA AJUSTE DE Λ

À medida que se torna menor a frequência de transporte ou maior a reatividade, maior fica a discrepância entre os resultados obtidos entre a equação cinética pontual clássica e a modificada. Como a equação modificada não é tão simples de se resolver, então um ajuste na equação de cinética poderia aproximar os resultados, de modo a estimar corretamente o comportamento no reator.

4.1 Fundamentação Teórica do Método

A proposta desse trabalho é aproximar a equação de cinética pontual clássica da modificada, de modo a criar uma equação de cinética pontual corrigida. Para tal, é proposto um fator de ajuste empírico α para o parâmetro de tempo médio de geração, de modo a criar um parâmetro Λ' , tal que:

$$\Lambda' \equiv \alpha\Lambda \quad (59)$$

De maneira que a equação de cinética pontual clássica será da forma:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda'} n(t) + \sum_{i=1}^N \lambda_i C_i(t). \quad (60)$$

Que nada mais é que a equação (44) corrigida por um fator modificador α .

Assumindo que a reatividade é constante e considerando apenas um grupo precursor, o cálculo do fator modificador é feito comparando os resultados do fator de amplitude obtidos pela equação (58) e da equação (57) de modo que o fator será obtido numericamente utilizando a modelagem computacional. Sabendo que n' é o fator de amplitude da equação de cinética pontual modificada e n o da clássica, o fator α será tal que:

$$\alpha = \frac{\Delta t(\rho_0 - \beta)n_{t+\Delta t}}{\Lambda(n'_{t+2\Delta t} - n_{t+\Delta t} - \Delta t \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_{i,t+\Delta t})} \quad (61)$$

Para o caso de apenas um grupo de precursores de nêutrons, tem-se que:

$$\alpha = \frac{\Delta t(\rho_0 - \beta)n_{t+\Delta t}}{\Lambda(n'_{t+2\Delta t} - n_{t+\Delta t} - \lambda\Delta t C_{t+\Delta t})} \quad (62)$$

4.2 Aplicação do Método

À partir da equação (62) pode-se determinar como α se comporta no tempo. Analisando as tabelas abaixo, vê-se que seu comportamento rapidamente se torna constante no tempo e, portanto, será feita a análise do comportamento da equação de cinética pontual corrigida utilizando este valor para o qual α se aproxima, considerando-o constante para uma determinada reatividade e determinada frequência de absorção de transporte de nêutrons.

Tabela 8 – Cálculo de α para as diferentes reatividades e $f_D = 10^4$.

Tempo (s)	$\rho = 0.001$	$\rho = 0.003$	$\rho = 0.006$
0.4	0.896117996	0.885683383	0.870442047
1	0.967730003	0.954147388	0.928325589
10	0.990493413	0.986396186	0.968928448
20	0.990493413	0.986396196	0.968934036
40	0.990493413	0.986396196	0.968934036
100	0.990493413	0.986396196	0.968934036

Tabela 9 – Cálculo de α para as diferentes reatividades e $f_D = 10^3$.

Tempo (s)	$\rho = 0.001$	$\rho = 0.003$	$\rho = 0.006$
0.4	0.411625451	0.405167464	0.395911538
1	0.603142690	0.581051641	0.549537249
10	0.913028685	0.884349760	0.810935594
20	0.913381443	0.885457497	0.813085087
40	0.913381443	0.885460166	0.813100566
100	0.913381443	0.885460166	0.813100567

Feito isso, podemos comparar os resultados obtidos pela equação de cinética pontual clássica, modificada e corrigida, de modo a visualizar o comportamento delas.

Tabela 10 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os dados de NUNES e os resultados obtidos pela equação de cinética pontual para um $\rho=0.001$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^4 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Modificada (NUNES)	Corrigida (Modelagem)
0.4	1.1173	1.0979	1.11612
1	1.1648	1.1528	1.16306
10	1.3186	1.3129	1.31481
20	1.5033	1.4946	1.49676
40	1.9537	1.9368	1.93966
100	4.2888	4.2151	4.22133

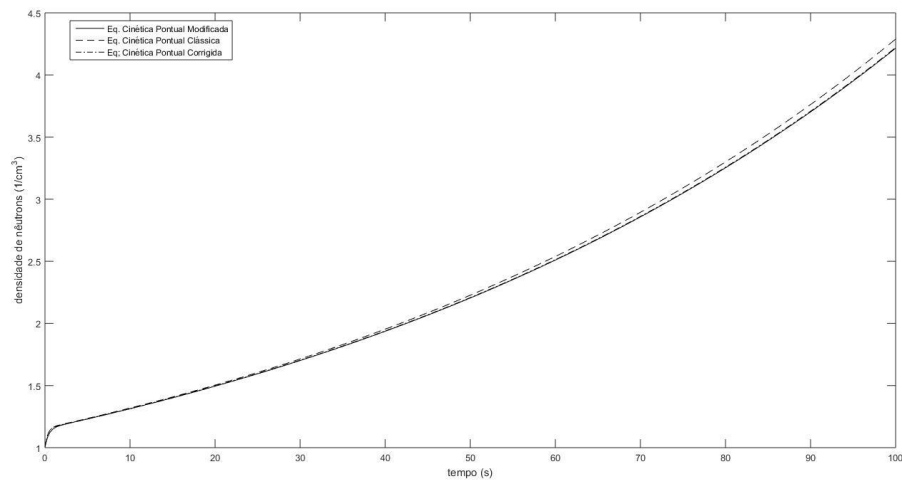


Figura 1 – Gráfico dos modelos de ECP ($\rho=0.001$ e $f_D=10^4 \text{ s}^{-1}$).

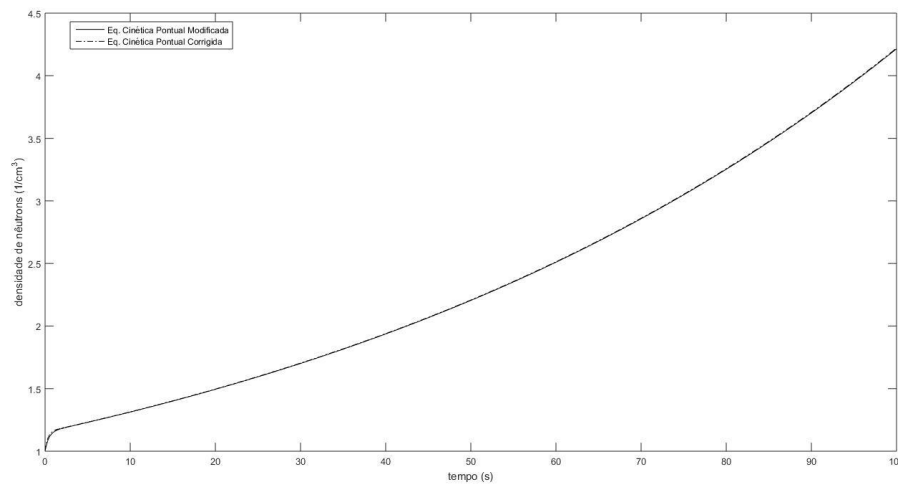


Figura 2 – ECP's modificadas e corrigidas ($\rho=0.001$ e $f_D=10^4 \text{ s}^{-1}$).

Tabela 11 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os dados de NUNES e os resultados obtidos pela equação de cinética pontual para um $\rho=0.001$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^3 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Modificada (NUNES)	Corrigida (Modelagem)
0.4	1.1173	1.0379	1.10642
1	1.1648	1.0798	1.14874
10	1.3186	1.2688	1.28438
20	1.5033	1.4279	1.44537
40	1.9537	1.8083	1.83043
100	4.2888	3.6727	3.71765

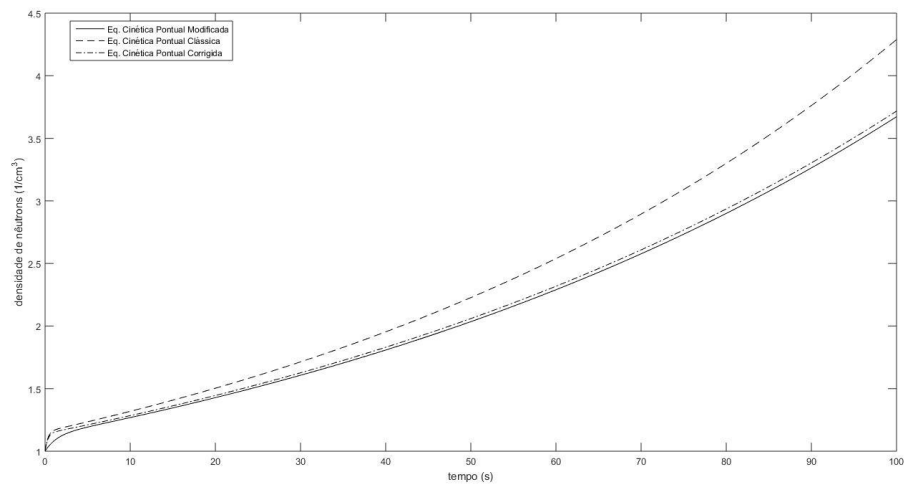


Figura 3 – Gráfico dos modelos de ECP ($\rho=0.001$ e $f_D=10^3 \text{ s}^{-1}$).

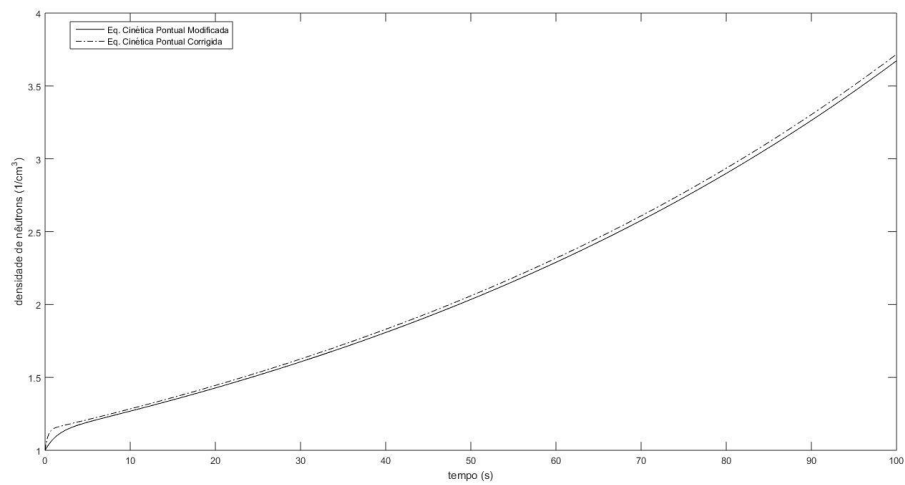


Figura 4 – ECP's modificadas e corrigidas ($\rho=0.001$ e $f_D=10^3 \text{ s}^{-1}$).

Tabela 12 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os dados de NUNES e os resultados obtidos pela equação de cinética pontual para um $\rho=0.003$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^4 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Modificada (NUNES)	Corrigida (Modelagem)
0.4	1.4161	1.3341	1.40897
1	1.6770	1.5954	1.66311
10	2.9278	2.8417	2.86650
20	5.1718	4.9561	4.99950
40	16.138	15.076	15.20806
100	490.25	424.36	428.07321

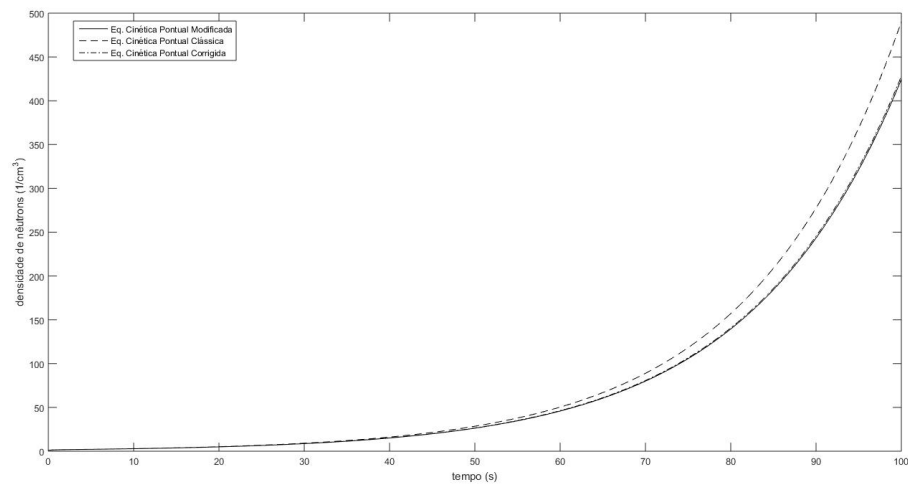


Figura 5 – Gráfico dos modelos de ECP ($\rho=0.003$ e $f_D=10^4 \text{ s}^{-1}$).

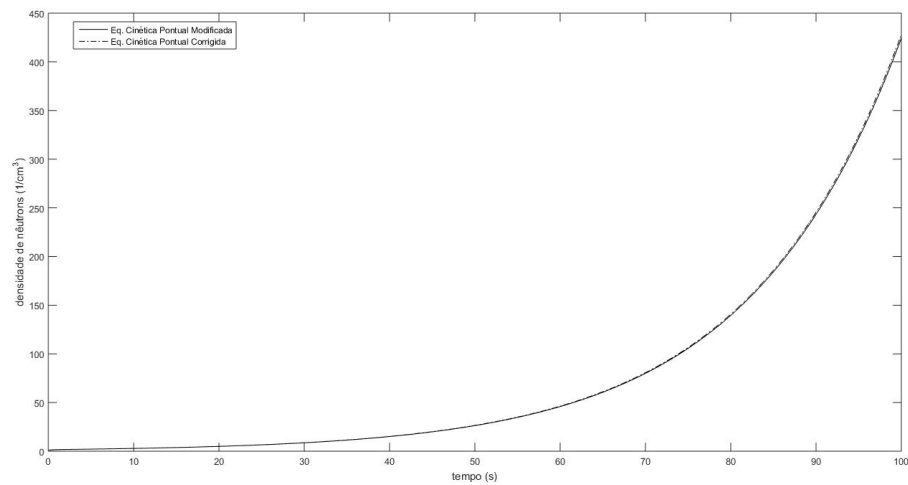


Figura 6 – ECP's modificadas e corrigidas ($\rho=0.003$ e $f_D=10^4 \text{ s}^{-1}$).

Tabela 13 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os dados de NUNES e os resultados obtidos pela equação de cinética pontual para um $\rho=0.003$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^3 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Modificada (NUNES)	Corrigida (Modelagem)
0.4	1.4161	1.1185	1.35766
1	1.6770	1.2640	1.56543
10	2.9278	2.3225	2.46962
20	5.1718	3.7127	3.94491
40	16.138	9.4734	10.06583
100	490.25	157.38	167.21960

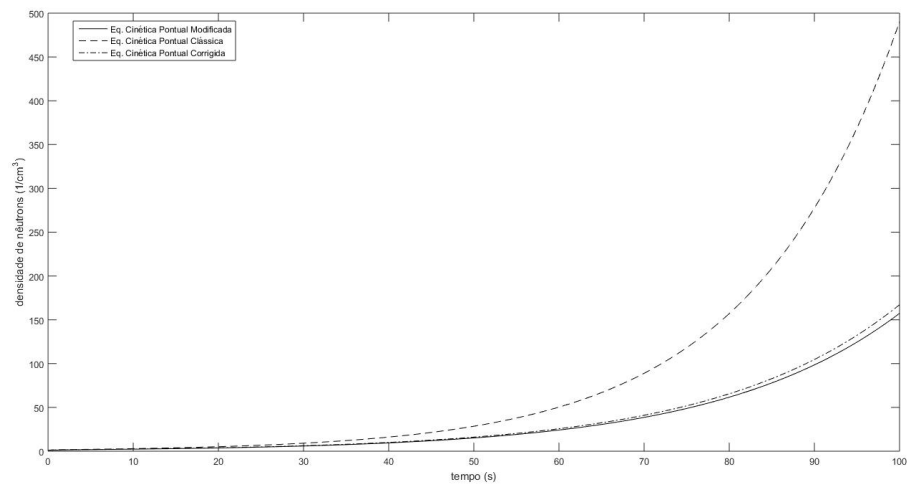


Figura 7 – Gráfico dos modelos de ECP ($\rho=0.003$ e $f_D=10^3 \text{ s}^{-1}$).

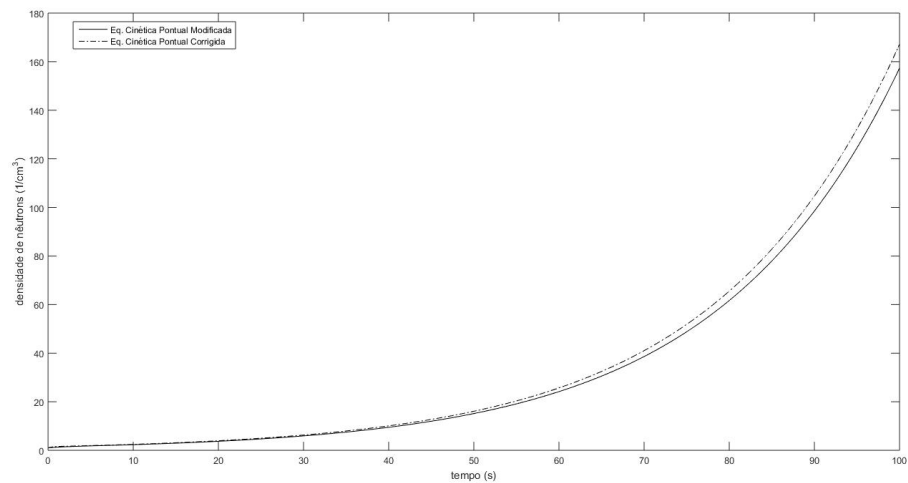


Figura 8 – ECP's modificadas e corrigidas ($\rho=0.003$ e $f_D=10^3 \text{ s}^{-1}$).

Tabela 14 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os dados de NUNES e os resultados obtidos pela equação de cinética pontual para um $\rho=0.006$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^4 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Modificada (NUNES)	Corrigida (Modelagem)
0.4	2.0958	1.8212	2.04285
1	3.4712	2.9008	3.29494
10	56.554	38.432	41.11291
20	947.92	487.09	521.05046
40	2.663×10^5	78236	83690.91754
100	5.905×10^{12}	3.242×10^{11}	3.46795×10^{11}

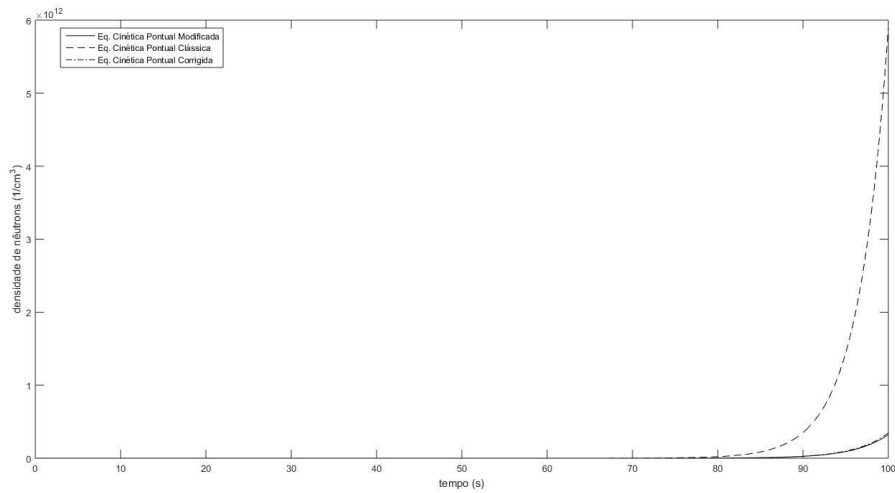


Figura 9 – Gráfico dos modelos de ECP ($\rho=0.006$ e $f_D=10^4 \text{ s}^{-1}$).

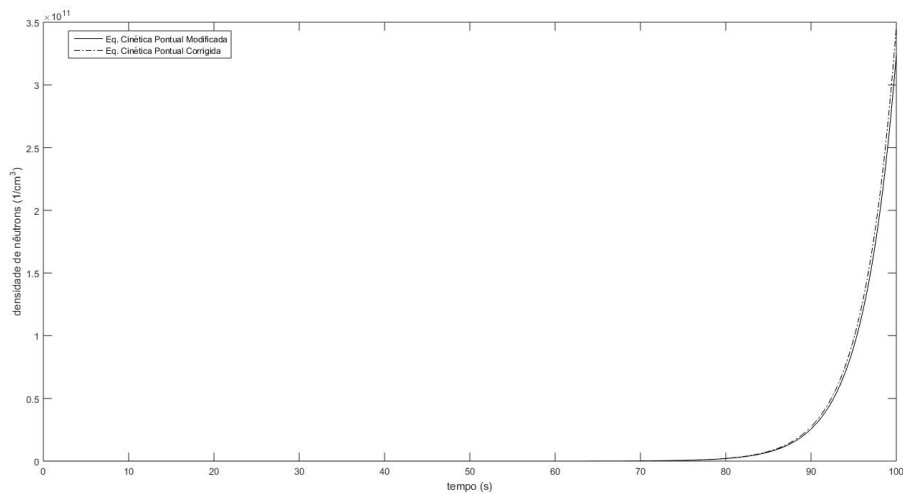


Figura 10 – ECP's modificadas e corrigidas ($\rho=0.006$ e $f_D=10^4 \text{ s}^{-1}$).

Tabela 15 – Comparação do cálculo de $n(t)$ (cm^{-3}) utilizando os dados de NUNES e os resultados obtidos pela equação de cinética pontual para um $\rho=0.006$ (reatividade) e um grupo de precursores com uma frequência de transporte de 10^3 s^{-1} .

Tempo (s)	Clássica (NUNES)	Modificada (NUNES)	Corrigida (Modelagem)
0.4	2.0958	1.2524	1.80111
1	3.4712	1.6157	2.57278
10	56.554	9.1475	11.89013
20	947.92	42.311	54.80234
40	2.663×10^5	898.86	1164.18907
100	5.905×10^{12}	8.617×10^6	11.16083×10^6

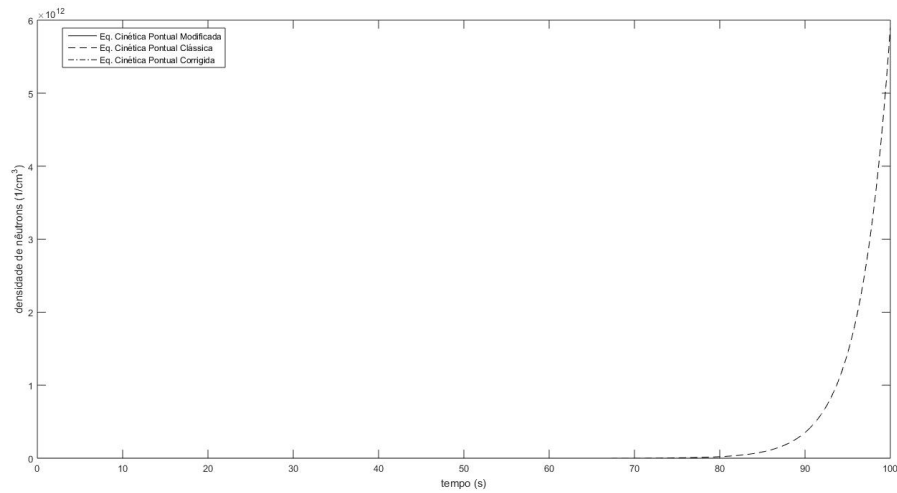


Figura 11 – Gráfico dos modelos de ECP ($\rho=0.006$ e $f_D=10^3 \text{ s}^{-1}$).

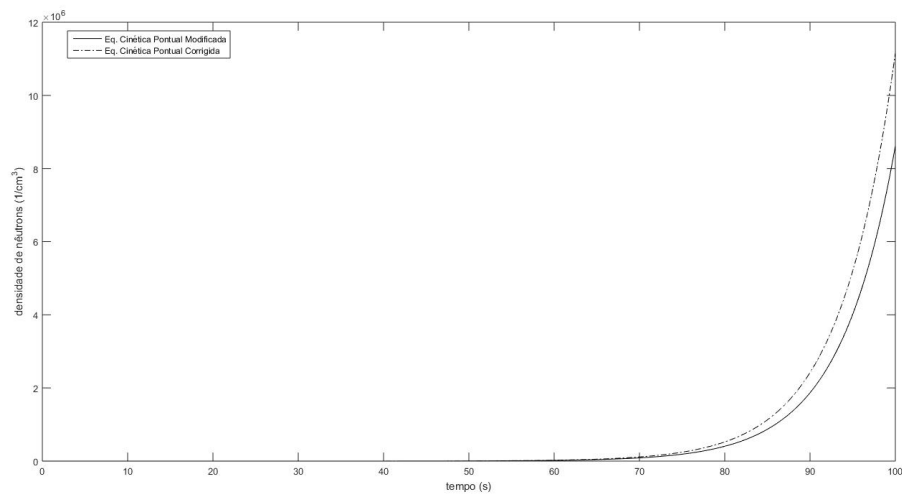


Figura 12 – ECP's modificadas e corrigidas ($\rho=0.006$ e $f_D=10^3 \text{ s}^{-1}$).

5 – FATOR DE AJUSTE ALFA

Este capítulo traz a apresentação dos gráficos obtidos para o fator modificador e mostra uma fórmula de aproximação do resultado para qualquer reatividade pertencente a um conjunto limitado para uma frequência de transporte constante.

5.1 Curvas de Alfa

Tendo como base tudo que foi exposto nos capítulos anteriores (principalmente o capítulo 4) pode-se ter uma noção de como será o comportamento do fator alfa quando se varia a reatividade e a frequência de transporte. Primeiramente foram calculados os diferentes alfas, utilizando a mesma modelagem computacional, variando a reatividade para um mesmo $f_D = 10^4 \text{ s}^{-1}$ e foi obtido o seguinte gráfico:

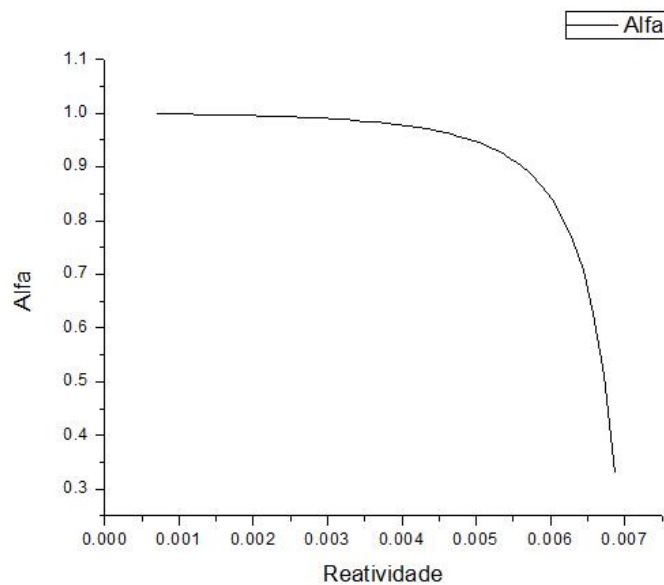


Figura 13 – Gráfico de α para diferentes reatividades e $f_D = 10^4 \text{ s}^{-1}$.

Observando o gráfico, pode-se notar que α se comporta de maneira mais harmoniosa para valores de reatividade menores que 0.006. Então, por praticidade, foi limitada a reatividade ($0 < \rho \leq 0.005$) e a frequência de transporte será $f_D \geq 10^4 \text{ s}^{-1}$. Os valores apresentados são mais comuns durante o funcionamento de um reator.

Dois casos foram feitos: um com $f_D = 10^4 \text{ s}^{-1}$ e outro com $f_D = 10^5 \text{ s}^{-1}$. Os resultados para valores acima desses considerados para a frequência de transporte são muito próximos aos resultados da equação de cinética pontual clássica. Para ambos foi feito um ajuste polinomial de ordem 6 e de ordem 5, respectivamente. A equação dos

ajustes de ordem 6 e de ordem 5 serão apresentados da seguinte forma, respectivamente:

$$\alpha(\rho) = B_6\rho^6 + B_5\rho^5 + B_4\rho^4 + B_3\rho^3 + B_2\rho^2 + B_1\rho + B_0 \quad (63)$$

$$\alpha(\rho) = B_5\rho^5 + B_4\rho^4 + B_3\rho^3 + B_2\rho^2 + B_1\rho + B_0 \quad (64)$$

Em que os parâmetros B_6 , B_5 , B_4 , B_3 , B_2 , B_1 e B_0 , são constantes a serem determinadas pelo ajuste polinomial.

O resíduo de alfa encontrado é o erro encontrado ao se comparar os resultados obtidos pelo ajuste polinomial com os valores de α obtidos pela modelagem computacional. Os resultados são mostrados abaixo:

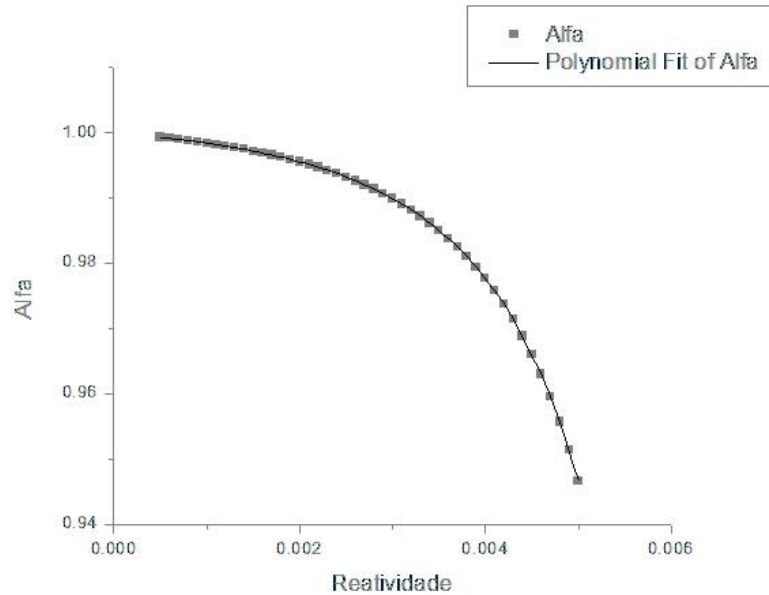


Figura 14 – Gráfico de α para $\rho \leq 0.005$ e $f_D = 10^4 \text{ s}^{-1}$.

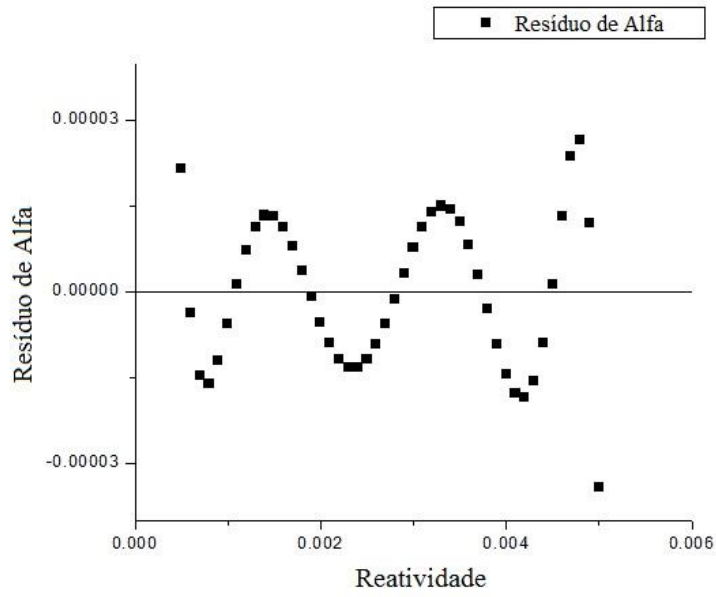


Figura 15 – Gráfico de resíduo de α para $\rho \leq 0.005$ e $f_D = 10^4 \text{ s}^{-1}$.

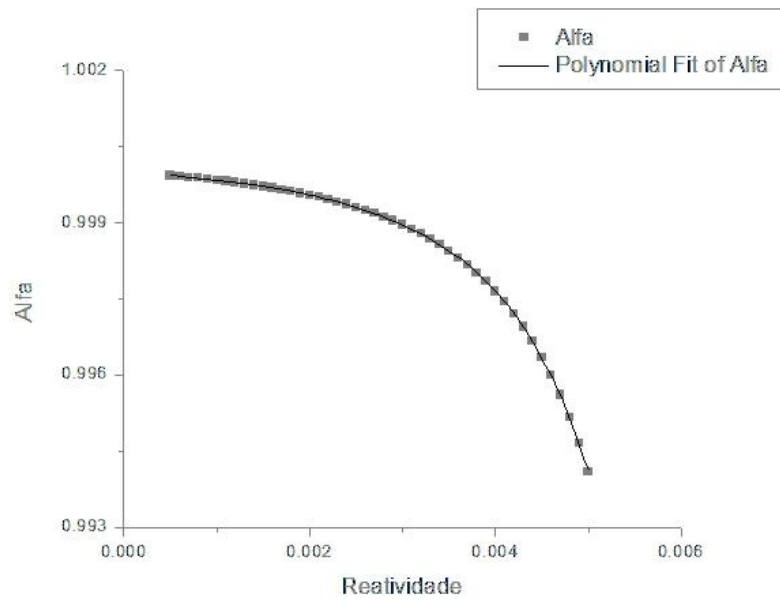


Figura 16 – Gráfico de α para $\rho \leq 0.005$ e $f_D = 10^5 \text{ s}^{-1}$.

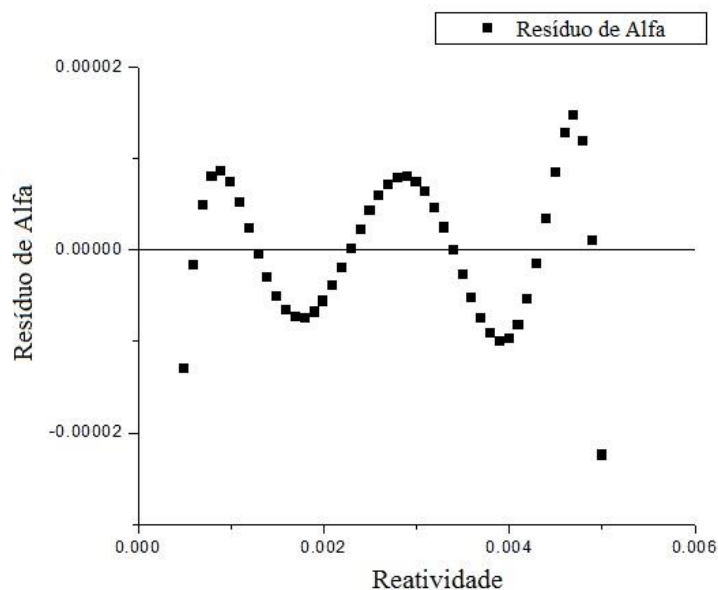


Figura 17 – Gráfico de resíduo de α para $\rho \leq 0.005$ e $f_D = 10^5 \text{ s}^{-1}$.

Tabela 16 – Coeficientes para a equação de alfa para $\rho \leq 0.005$ e $f_D = 10^4 \text{ s}^{-1}$.

		Valor	Desvio Padrão
Alfa	B0	0.99935	1.0175E-4
	B1	1.48172	0.34664
	B2	-4339.3638	433.45492
	B3	2.85867E6	260293.17434
	B4	-1.12167E9	8.06741E7
	B5	2.11182E11	1.24209E10
	B6	-1.17139E13	7.50978E11
Adj. R ²	1		

Tabela 17 – Coeficientes para a equação de alfa para $\rho \leq 0.005$ e $f_D = 10^5 \text{ s}^{-1}$.

		Valor	Desvio Padrão
Alfa	B0	1.00019	3.15314E-5
	B1	-0.77399	0.08638
	B2	743.21366	82.18471
	B3	-419278.73777	3498.83057
	B4	1.00458E8	6.80003
	B5	-9.97241E	4.9283E8
Adj. R ²	0.99997		

Estes são os valores dos coeficientes das funções de alfa para uma reatividade limitada e uma frequência de transporte específica. Como o coeficiente de determinação R^2 é um valor próximo de 1, pode-se notar que a curva se ajusta muito bem à amostra.

6 - CONCLUSÃO E PERSPECTIVAS FUTURAS.

À partir dos resultados expostos, pode-se concluir que é possível, através de um ajuste empírico no parâmetro de tempo médio de geração, aproximar os resultados da equação da cinética pontual clássica aos resultados da equação da cinética modificada, bastando modificá-la para casos mais específicos, assim como foi exemplificado neste trabalho.

Os resultados alcançados utilizando da metodologia proposta são de grande valia, porque dispensam a aplicação de métodos mais sofisticados para solução da equação de cinética pontual modificada, bastando apenas aplicar o parâmetro α à cinética pontual clássica, de modo a obter os mesmo resultados.

A metodologia proposta apresenta ainda a vantagem de preservar a mesma forma funcional da cinética clássica, possibilitando que os métodos analíticos e numéricos já consolidados na literatura sejam utilizados. De modo que o ajuste empírico é de grande valia para a obtenção de uma formulação simplificada e mais elegante da equação de cinética pontual modificada.

Para trabalhos futuros, é possível fazer a análise em três dimensões, variando a frequência de transporte, a reatividade e encontrando o alfa, de modo a observar melhor o comportamento de alfa em função de dois parâmetros, analisar o comportamento de alfa e da equação de cinética pontual com o a fator de ajuste do tempo médio para casos com mais grupos de precursores de nêutrons, bem como buscar uma fundamentação física para obtenção do parâmetro de ajuste dispensando assim o ajuste empírico.

BIBLIOGRAFIA

NUNES, A. L.; SENRA, A. M.; SILVA, F. C.; PALMA, D. A. P. **A New Formulation to Point Kinetics Equations Considering the Time Variation of the Neutron Currents**. Rio de Janeiro, RJ, Departamento de Engenharia Nuclear, COPPE/UFRJ, 2015.

DUDERSTADT, J. J.; HAMILTON, L. J. **Nuclear Reactor Analysis**, Nova York, NY, Ed. John Wiley and Sons, 1976.

LAMARSH, J. R. **Introduction to Nuclear Reactor Theory**, 2. ed., Addison-Wesley, 1983.

RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. R. **Cálculo Numérico: Aspectos Teóricos e Computacionais**, São Paulo, SP, Makron Books, 1998.