



A INFLUÊNCIA DA APROXIMAÇÃO REFERENTE À DERIVADA DA CORRENTE DE NÊUTRONS NAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL

Anderson Lupo Nunes

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

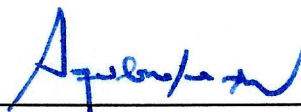
Rio de Janeiro
Abril de 2015

A INFLUÊNCIA DA APROXIMAÇÃO REFERENTE À DERIVADA DA CORRENTE DE
NÊUTRONS NAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL

Anderson Lupo Nunes

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA
DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS
PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA
NUCLEAR.

Examinada por:



Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.



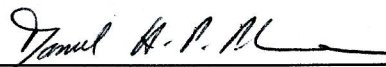
Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.



Prof. Antônio Carlos Marques Alvim, PhD



Profa. Cláudia Pereira Bezerra Lima, PhD



Prof. Daniel Artur Pinheiro Palma, D.Sc.



Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.



Prof. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

ABRIL DE 2015

Nunes, Anderson Lupo

A Influência da Aproximação Referente à Derivada da Corrente de Nêutrons nas Equações da Cinética Pontual / Anderson Lupo Nunes. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XII, 110 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Aquilino Senra Martinez

Fernando Carvalho da Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 111-114.

1. Física de Reatores. 2. Cinética Pontual. 3. Equação de Transporte. I. Martinez, Aquilino Senra *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

Dedicatória

Este trabalho é dedicado aos meus pais por tudo o que fizeram por mim ao longo da vida e a minha esposa Cláudia pelo apoio incondicional em todas as horas.

Agradecimentos

Agradeço ao Deus do meu coração e da minha compreensão pelas dificuldades, alegrias e aprendizados que me fizeram mais forte para ser capaz de concluir este trabalho.

Agradeço ao meu orientador o professor Aquilino Senra Martinez por seu trabalho eficaz e motivacional. Graças a ele concluímos satisfatoriamente.

Agradeço a meu co-orientador o professor Fernando Carvalho da Silva pela paciência e objetividade no apoio fundamental que recebi dele.

Agradeço aos demais alunos do PEN que me antecederam e os que ainda estão por aí pelo incentivo e companheirismo.

Agradeço aos colegas, alunos e direção do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ) pela torcida e apoio para que pudesse chegar ao término deste trabalho. Em particular gostaria de citar os colegas Rafael, Thiago, Anderson e Nilton (in memoriam) por seu inestimável incentivo.

Agradeço ao meu irmão Alyson pelo apoio, bem como aos demais familiares. Esta vitória é de vocês também.

Agradeço a minha amada esposa Cláudia pela imensa paciência e apoio nos momentos mais difíceis e solitários da elaboração deste trabalho.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

A INFLUÊNCIA DA APROXIMAÇÃO REFERENTE À DERIVADA DA CORRENTE DE NÊUTRONS NAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL

Anderson Lupo Nunes

Abril/2015

Orientadores: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

A proposta desta tese é o estudo da influência da aproximação referente à derivada da corrente de nêutrons nas Equações da Cinética Pontual. Uma nova formulação para as equações é apresentada sendo chamado de Equações da Cinética Pontual Modificadas. É feita uma análise deste novo modelo em comparação com o modelo clássico. As soluções para o novo modelo são obtidas pela técnica da Transformada de Laplace e pelo método de Diferenças Finitas para as equações com um grupo de precursores. Com seis grupos de precursores os resultados são obtidos pelo método de Diferenças Finitas. É feita uma análise quantitativa a partir dos resultados obtidos para um grupo de precursores e para seis grupos de precursores. Possibilidades de abertura de um novo campo de investigações acerca das Equações da Cinética Pontual Modificadas são apresentadas, com continuação natural deste trabalho.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

THE INFLUENCE OF APPROXIMATION OF THE NEUTRON CURRENTS
DERIVATIVE IN THE POINT KINETICS EQUATIONS

Anderson Lupo Nunes

April/2015

Advisors: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

The proposal of this thesis is to study the influence of related approximation to the derivative of the neutron current in Kinetics Point Equations. A new formulation for the equations is shown being called Modified Kinetics Point Equations. A analysis of the model is made in comparison with the classical model. The solutions for the new model are obtained by Laplace transform technique and the finite difference method for equations with a group of precursors. To six groups of precursors results are obtained by finite difference method. A quantitative analysis of the results obtained from a group of precursors and six groups of precursors is made. Opening possibilities of a new field of research into the Modified Kinetics Point Equations are presented with natural continuation of this work.

Sumário

Lista de Figuras.....	ix
Lista de Tabelas.....	xii
1. Introdução.....	1
2. A Cinética Pontual Clássica.....	7
2.1. A Obtenção das Equações da Cinética Pontual Clássica	7
2.2. A Validade das Equações da Cinética Pontual Clássica.....	20
3. A Obtenção das Equações da Cinética Pontual Modificada.....	22
4. Análise da Aproximação Referente à Derivada da Corrente de Nêutrons.....	34
5. Soluções para as Equações da Cinética Pontual com um Grupo de Precusores.....	40
5.1. Solução das Equações da Cinética Pontual Clássica com um grupo de precusores usando a técnica da Transformada de Laplace.....	41
5.2. Solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com um grupo de precusores usando a técnica da Transformada de Laplace.....	47
5.3. Solução das Equações da Cinética Pontual Clássica com um grupo de precusores usando o método de Diferenças Finitas.....	54
5.4. Solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com um grupo de precusores usando o método de Diferenças Finitas.....	57
6. Soluções para as Equações da Cinética Pontual com seis Grupos de Precusores.....	60
6.1. Solução das Equações da Cinética Pontual Clássica com seis grupos de precusores usando o Método de Diferenças Finitas.....	62
6.2. Solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com seis grupos de precusores usando o Método de Diferenças Finitas.....	66
7. Resultados.....	69
7.1 Resultados com um grupo de precusores.....	70
7.2 Resultados com seis grupos de precusores.....	91
8. Considerações Finais.....	107
9. Referências Bibliográficas.....	111

Lista de Figuras

- Figura 7.1 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Clássica por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.....72
- Figura 7.2 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s⁻¹ por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.....73
- Figura 7.3 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s⁻¹ por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.....74
- Figura 7.4 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 100$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.....75
- Figura 7.5 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 20$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.....76
- Figura 7.6 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 80$ s até $t = 100$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.....77
- Figura 7.7 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Clássica por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....79
- Figura 7.8 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s⁻¹ por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....80
- Figura 7.9 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s⁻¹ por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....81
- Figura 7.10 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 100$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....82
- Figura 7.11 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 20$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....83
- Figura 7.12 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 80$ s até $t = 100$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....84

Figura 7.13 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Clássica por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.....	86
Figura 7.14 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s ⁻¹ por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.....	87
Figura 7.15 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s ⁻¹ por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.....	88
Figura 7.16 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 20$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.....	89
Figura 7.17 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 70$ s até $t = 85$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.....	90
Figura 7.18 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 20$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm considerando seis grupos de precursores.....	93
Figura 7.19 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,2$ s até $t = 2,0$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm considerando seis grupos de precursores.....	94
Figura 7.20 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 14$ s até $t = 18$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm considerando seis grupos de precursores.....	95
Figura 7.21 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 10$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm considerando seis grupos de precursores.....	97
Figura 7.22 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,0$ s até $t = 3,0$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm considerando seis grupos de precursores.....	98
Figura 7.23: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 8,0$ s até $t = 10,0$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm considerando seis grupos de precursores.....	99
Figura 7.24 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,0$ s até $t = 2,0$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm considerando seis grupos de precursores.....	101
Figura 7.25 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,00$ s até $t = 0,20$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm considerando seis grupos de precursores.....	102

Figura 7.26 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 1,80$ s até $t = 2,00$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm considerando seis grupos de precursores.....103

Figura 7.27 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,00$ s até $t = 0,15$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 800 pcm considerando seis grupos de precursores.....105

Figura 7.28 Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,75$ s até $t = 0,90$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 800 pcm considerando seis grupos de precursores.....106

Lista de Tabelas

Tabela 6.1 Parâmetros dos Grupos de Precursores de Nêutrons para o U^{235}	61
Tabela 7.1 Parâmetros usados nos testes com um grupo de precursores.....	70
Tabela 7.2 Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para um grupo de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.....	71
Tabela 7.3 Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para um grupo de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....	78
Tabela 7.4 Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para um grupo de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.....	85
Tabela 7.5 Parâmetros usados nos testes com seis grupos de precursores.....	91
Tabela 7.6 Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.....	92
Tabela 7.7 Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm.....	96
Tabela 7.8 Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.....	100
Tabela 7.9 Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 800 pcm.....	104

1. Introdução

A geração de energia elétrica a partir da Fissão Nuclear continua relevante no cenário energético atual devido a crescente demanda de energia elétrica e a insuficiência das chamadas fontes alternativas de energia elétrica para suprirem plenamente esta demanda. Segundo CHAVES & SHELLARD [1] é inquestionável que a energia nuclear tem plenas condições de suprir a maior parte da demanda de energia elétrica no mundo para a segunda metade do século XXI. Apesar das críticas de grupos de ambientalistas devido ao risco de acidente e ao manejo dos rejeitos radioativos, ainda segundo CHAVES & SHELLARD [1], a alternativa do uso de reatores de fissão nuclear torna-se mais vantajosa quando ocorre o reprocessamento do combustível nuclear usado para a extração de produtos economicamente relevantes, como por exemplo, o plutônio. Logo, justifica-se plenamente toda a pesquisa que é desenvolvida na grande área de Física de Reatores que é extremamente relevante quando se trata do projeto e operação de um Reator de Fissão Nuclear.

A linha de pesquisa da área de Física de Reatores que será abordada nesta tese é a cinética pontual. Segundo DUDERSTADT & HAMILTON [2] é importante que se possa conhecer o comportamento temporal da população de nêutrons no núcleo de um reator nuclear. A potência é um parâmetro de grande relevância que é dependente da variação temporal da densidade de nêutrons no núcleo de um reator nuclear. A partir da cinética pontual é possível obter a densidade de nêutrons, desde que a variação da reatividade ao longo do tempo seja conhecida.

HENRY [3] afirma que quando o livre caminho médio é longo o suficiente e quando o tempo de meia vida dos fragmentos de fissão é bastante curto, os efeitos de uma perturbação local se espalham rapidamente pelo reator nuclear. A consequência imediata desta perturbação local é o reajustamento da forma do fluxo de nêutrons. Ainda segundo HENRY [3], as situações transientes presentes em um reator nuclear podem ser previstas apenas pela alteração do fluxo de nêutrons e, portanto, é possível fazer uma previsão suficientemente precisa acerca das consequências das perturbações. Basta relacionar a magnitude do fluxo de nêutrons, que varia ao longo do tempo, com a população de nêutrons no núcleo de um reator nuclear. As equações da cinética pontual relacionam estes parâmetros e, desta forma, permitem um estudo acerca de situações transientes que podem ocorrer em um reator nuclear,

como por exemplo, a movimentação das barras de controle, a parada ou a retomada de operação de um reator nuclear e outras situações que podem caracterizar algum tipo de acidente no núcleo do reator.

A obtenção das equações da cinética pontual ocorre a partir de uma seqüência de aproximações que são feitas a partir da teoria mais ampla que envolve o fluxo de nêutrons em um reator nuclear, a teoria do transporte de nêutrons. Sua obtenção pode ser feita diretamente da equação de transporte de nêutrons, da equação da difusão de nêutrons ou através de um procedimento heurístico. Todas conduzem à mesma forma funcional do sistema de equações diferenciais da cinética pontual, mas com coeficientes distintos. A conhecida Lei de Fick é uma aproximação largamente adotada na literatura acerca da difusão de nêutrons e da cinética pontual. Em relação a equação de difusão de nêutrons monoenergética, segundo DUDERSTADT & HAMILTON [2], o caso estacionário é o mais importante e a aproximação da Lei de Fick é suficiente. Mas quando se trata da cinética pontual a Lei de Fick é deduzida a partir, dentre outras, da hipótese de que a derivada da densidade de corrente de nêutrons é desprezível em comparação com a frequência das colisões. Esta hipótese pode não ser válida e a diferença nos resultados pode ser relevante para muitas aplicações.

Na prática, o uso das equações da cinética pontual é feito na chamada cinética inversa, onde obtém-se a reatividade a partir de um histórico da potência nuclear. Segundo DUDERSTADT & HAMILTON [2], existem poucos problemas para os quais seja possível obter uma solução exata para a densidade de nêutrons dada uma reatividade específica. Na verdade, é frequentemente mais apropriado inverter o problema, calculando a reatividade que vai determinar o comportamento passado da densidade de nêutrons que se expressa a partir de uma relação direta com a potência nuclear. Este procedimento está mais em conformidade com a metodologia de controle do reator nuclear.

Alguns artigos mais antigos apresentam diversas técnicas para a obtenção da solução das Equações da Cinética Pontual Clássica. Em CHAO & ATTARD [4] é desenvolvido um método que se propõem a solucionar o problema desacoplando as equações referentes a densidade dos nêutrons e a concentração dos precursores visando o confinamento da rigidez do sistema numérico. Um estudo visando aperfeiçoar este método foi feito na dissertação de mestrado de NUNES [5]. Em SÁNCHEZ [6] foi obtida a solução das supracitadas equações a partir do método de Runge-Kutta Generalizado que também se propõem a resolver o problema da rigidez do sistema de forma rápida e eficaz. KINARD & ALLEN [7] desenvolvem um método eficaz para o cálculo das Equações da Cinética Pontual Clássica, denominado por PCA (Piecewise Constant Approximations), ou seja, aproximações de intervalo constante. Nota-se

que a partir de um certo momento os artigos propondo diferentes metodologias para o cálculo da Cinética Pontual Clássica vão se tornando mais escassos.

Por outro lado surgem pesquisas relevantes com relação à obtenção de soluções analíticas para as Equações da Cinética Pontual Clássica. PALMA, MARTINEZ & GONÇALVES [8] obtém a solução das referidas equações para o caso de uma variação linear da reatividade durante o procedimento de start-up (acionamento) de um reator nuclear. REBELLO, MARTINEZ e GONÇALVES [9] obtém uma solução analítica para o modelo de Cinética Pontual proposto por GANDINI & SALVATORES [10] para um reator nuclear do tipo ADS, com uma variação da reatividade linear e a adoção da aproximação da função Gamma Incompleta. LEITE et al [11] determinam uma representação analítica para as Equações da Cinética Pontual Clássica com um degrau de tempo adaptado. Um outro estudo feito acerca das equações de cinética para um reator nuclear do tipo ADS é feito por GONÇALVES, MARTINEZ & SILVA [12] com uma relevante comparação entre as diversas formulações. ZHANG, CHEN. & GUI [13] também apresentam uma solução analítica para as Equações da Cinética Pontual numa situação de start-up.

Alguns artigos recentes avaliam o modelo da cinética pontual clássica, propondo outros modelos similares. ESPINOSA- PAREDES *et. al* [14], deduzem um modelo da cinética pontual fracionária, que utiliza equações para a cinética pontual com termos de derivada de ordem não inteira, ou seja, adota derivadas fracionárias. Eles partiram dos desenvolvimentos feitos por EDWARDS, FORD & SIMPSON [15] e também por ESPINOSA- PAREDES *et. al* [16]. Posteriormente, SAHA RAY & PATRA [17] desenvolvem o cálculo para a obtenção da solução das equações da cinética pontual fracionárias a partir do uso da técnica de diferenças finitas. LEYVA [18] obtém uma solução numérica para uma formulação Integro-Diferencial da Cinética Pontual Clássica, eliminando a concentração de precursores e obtendo assim uma única equação com uma única variável, mesmo quando se considera seis grupos de precursores.

Em relação as Equações da Cinética Pontual com Realimentação Termo-hidráulica existe o trabalho recente de PALMA et al. [19] que propõem uma técnica alternativa para a implantação de uma solução analítica para transientes com feedback de temperatura na Cinética Pontual com um grupo de precursores. Além desse trabalho, na dissertação de CARVALHO [20] apresenta-se a Cinética pontual com Realimentação Termo-hidráulica para um simulador digital de princípios básicos de um reator nuclear do tipo PWR.

A Cinética Inversa também apresenta um panorama promissor, considerando alguns trabalhos relevantes. GONÇALVES [21] faz a monitoração da reatividade em um reator nuclear a partir do histórico da potência nuclear, realizando o cálculo por meio dos diferentes métodos: método do trapézio, método de Simpson e método diferencial. Para suavizar os resultados

experimentais do histórico de potência nuclear foi adotado o método da média móvel. Em SUESCÚN [22] foi feito um cálculo da reatividade usando a Transformada de Laplace e o filtro FIR. A Equação Cinética Pontual Inversa é resolvida, portanto, a partir de um método que emprega uma versão discreta da Transformada de Laplace. ANTOLIN et al [23] calculam a reatividade em um reator nuclear subcrítico do tipo ADS usando o método de derivadas parciais. Foi feita a comparação dos seus resultados com uma simulação via Monte Carlo para um reator nuclear do tipo ADS.

Nota-se que a o modelo da cinética pontual clássica vem atendendo às necessidades básicas para controle e operação de um reator nuclear, mas isso não implica que a investigação científica acerca do tema esteja encerrada, como se vê pela breve revisão bibliográfica apresentada acima. Pode-se destacar a relevância de uma análise em termos de situações transientes e pela monitoração da reatividade a partir do cálculo efetuado pela cinética pontual inversa.

O objetivo principal desta tese de doutorado é deduzir um novo modelo para a cinética pontual a partir das equações de transporte de nêutrons, sem realizar todas as aproximações que resultam na consagrada Lei de Fick. O resultado são equações da cinética pontual com termos adicionais e que a princípio são relevantes para a análise. O modelo da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons, chamado de modelo da cinética pontual modificado, é deduzido e avaliado na presente tese de doutorado.

Esta tese pode se justificar, portanto, pela necessidade de um controle mais preciso e confiável da potência nuclear em situações transientes, ou seja, de dependência temporal, o que implica substituir modelos mais simples obtidos por aproximações consagradas pelo uso por modelos mais abrangentes que, devido ao desenvolvimento computacional, podem ser resolvidos em um tempo bastante reduzido. A inovação do método apresentado neste trabalho consiste em adotar uma equação mais completa para se deduzir as equações da cinética pontual modificada ao invés de adotar a Lei de Fick. O uso da Lei de Fick no procedimento realizado resulta nas equações da cinética pontual clássica, enquanto o uso da equação mais completa resulta no novo sistema de equações apresentado nesta tese.

No primeiro capítulo é feita uma breve introdução dos modelos da cinética pontual clássica e da cinética modificada que não tem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons. É feita uma breve revisão bibliográfica a respeito da cinética pontual a partir de artigos publicados recentemente e é feito um resumo do que é tratado nesta tese de doutorado.

No segundo capítulo é feita uma dedução formal das equações da cinética espacial, a partir da equação de transporte de nêutrons. Chega-se nas equações que resultarão posteriormente nas equações da cinética pontual clássica e também nas equações da cinética pontual modificada. Em seguida são apresentadas as equações da cinética pontual clássica partindo. Alguns comentários são feitos acerca das aproximações que possibilitaram a obtenção das equações clássicas.

No terceiro capítulo as aproximações que resultam na Lei de Fick são revistas e um novo modelo para a cinética pontual é obtido a partir das equações da cinética espacial deduzidas no segundo capítulo sem considerar a derivada do logaritmo da corrente desprezível.

No quarto capítulo é feita uma análise qualitativa das equações da cinética pontual modificada e é feito um cálculo dos parâmetros cinéticos considerando que trata-se de um reator nuclear homogêneo.

No quinto capítulo é obtida uma solução analítica para as equações da cinética pontual sem a aproximação da derivada do logaritmo da corrente de nêutrons com um grupo de precursores através do método de transformada de Laplace. É obtida também uma solução numérica para as equações da cinética pontual modificadas através do método de diferenças finitas. É feita uma comparação com a solução analítica da cinética clássica e com resultados da literatura.

No sexto capítulo é obtida uma solução numérica para a cinética pontual sem a aproximação da derivada do logaritmo da corrente de nêutrons com seis grupos de precursores através do método de diferenças finitas. É feita uma comparação com a solução numérica da cinética pontual clássica.

No sétimo capítulo são apresentados os resultados deste trabalho. É obtida a densidade de nêutrons a partir das equações da cinética pontual clássica, resolvida analiticamente e por diferenças finitas e também a partir das equações da cinética pontual modificadas, resolvida analiticamente e por diferenças finitas para um grupo de precursores com a inserção de um degrau de reatividade de 0,001, 0,003 e 0,007. A escolha destes valores de reatividade foi feita com base na situação típica de um reator PWR, que situa-se entre 100pcm (ou 0,001) e 400pcm (ou 0,004), extrapolando-se para um valor igual a 0,007 que coincide com a fração de nêutrons retardados, conforme comentário feito em ANTOLIN et al [23]. Também é obtida a densidade de nêutrons a partir de ambas as equações, clássica e modificada, resolvida apenas por meio da técnica de diferenças finitas para o caso de seis grupos de precursores. No caso do uso da Equação da Cinética Pontual Modificada com seis grupos de precursores foi feita a inserção de um degrau de reatividade constante e igual a 0,003, 0,0055, 0,007 e 0,008. A

escolha destes valores de reatividade foi feita com base nas referências CHAO & ATTARD [4], NUNES [5], SÁNCHEZ [6] e KINARD & ALLEN [7].

No oitavo capítulo trata-se dos resultados obtidos em uma análise comparativa com os objetivos desta tese. As possibilidades futuras de aprofundamento da pesquisa e suas implicações são avaliadas. São feitas as considerações finais.

No nono capítulo são listadas as referências bibliográficas.

2. A Cinética Pontual Clássica

A Cinética Pontual Clássica é adotada para cálculos rápidos da potência nuclear porque trata-se de um modelo simples e eficaz para estudar as situações dinâmicas de um reator nuclear. Através das suas equações são obtidos os resultados referentes às conseqüências da inserção de reatividade no núcleo do reator, como nos casos de início de operação, controle, desligamento e simulação de acidentes, com o objetivo de reduzir os riscos decorrentes.

As Equações da Cinética Pontual Clássica permitem a obtenção da estimativa do número de nêutrons existentes no núcleo do reator, bem como a concentração dos nêutrons retardados. Uma vez que a potência nuclear é diretamente proporcional ao número de nêutrons, ela também pode ser obtida, de maneira indireta ou mesmo direta, dependendo da forma como as equações são apresentadas.

2.1 A Obtenção das Equações da Cinética Pontual Clássica

A teoria de transporte de nêutrons é o modelo mais abrangente que descreve o comportamento do fluxo neutrônico em um reator nuclear. É descrita em diversas referências da literatura científica da área, quais sejam, DUDERSTADT & HAMILTON [2], HETRICK [24], AKCASU, LELLOUCHE & SNOTKIN [25], dentre outras.

Considera-se as equações de transporte de nêutrons escrita em termos do fluxo angular de nêutrons $\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$, segundo DUDERSTADT & HAMILTON [2],

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)}{\partial t} + \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \frac{1}{4\pi} (1 - \beta) \chi_p(E) \int_{4\pi}^{\infty} \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' + \int_{4\pi}^{\infty} \int_0^{\infty} \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' + \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \int_{4\pi}^{\infty} \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' - \lambda_i C_i(\vec{r}, t), \quad (2.2)$$

onde $i = 1, 2, \dots, N$.

As definições dos parâmetros são feitas a baixo.

$\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ = fluxo angular de nêutrons

$C_i(\vec{r}, t)$ = concentração de precursores

$v(E)$ = velocidade dos nêutrons

$\hat{\Omega} = \text{sen}(\theta) \cos(\alpha) \hat{e}_x + \text{sen}(\theta) \text{sen}(\alpha) \hat{e}_y + \cos(\theta) \hat{e}_z$ = vetor unitário na direção do deslocamento dos nêutrons

$d\hat{\Omega} = \text{sen}(\theta) d\theta d\alpha$ = ângulo sólido

$\Sigma_t(\vec{r}, E, t)$ = seção de choque macroscópica total com energia E em um instante t.

$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, t)$ = seção de choque macroscópica de espalhamento com energia E em um instante t.

$\Sigma_f(\vec{r}, E', t)$ = seção de choque macroscópica de fissão com energia E em um instante t.

$\nu(E')$ = número médio de nêutrons emitidos na fissão causada por um nêutron com energia E.

$\chi(E) dE$ = número médio de nêutrons emitidos na fissão que nascem com energia E em dE.

β = fração de nêutrons retardados em relação ao total de nêutrons.

β_i = fração de nêutrons retardados do grupo de precursores i em relação ao total de nêutrons.

λ_i = constante de decaimento de nêutrons precursores do grupo i.

A seção de choque de espalhamento é expandida em termos do polinômio de Legendre até o segundo termo, ou seja, a expansão é feita para $l = 0$ e $l = 1$.

$$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, t) \cong \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \Sigma_{sl}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) P_l(\cos(\xi)) \quad (2.3)$$

Onde ξ é o ângulo entre as direções $\hat{\Omega}'$ e $\hat{\Omega}$. Logo,

$$P_l(\cos(\xi)) = P_l(\hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega})$$

$$P_0(\cos(\xi)) = 1$$

$$P_1(\cos(\xi)) = \cos(\xi) = \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}$$

A equação (2.3) pode ser reescrita:

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

Substitui-se a equação (2.4) na equação (2.1) e a seguir é feita a integração no ângulo sólido.

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \\ & + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \int_{4\pi} \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) d\hat{\Omega} + \\ & + \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_p(E) \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} + \\ & + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} + \\ & + \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega} dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} \end{aligned} \quad (2.5)$$

Definem-se:

$$\phi(\vec{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \text{fluxo de nêutrons com energia E em um instante t.}$$

$$\bar{J}(\vec{r}, E, t) \equiv \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \hat{\Omega} d\hat{\Omega} = \text{corrente líquida de nêutrons com energia E em um instante t.}$$

Cada termo da equação (2.5) é resolvido levando-se em conta as definições acima.

O primeiro termo é:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t}$$

O segundo termo é:

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} &= \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \left(\hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \\ &= \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \\ &= \hat{e}_x \cdot \frac{\partial}{\partial x} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \hat{e}_y \cdot \frac{\partial}{\partial y} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \hat{e}_z \cdot \frac{\partial}{\partial z} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \\ &= \left(\hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \hat{\Omega} d\hat{\Omega} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t) \end{aligned}$$

O terceiro termo é:

$$\Sigma_t(\vec{r}, E, t) \int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, E, t)$$

O quarto termo é:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \int_{4\pi} \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) d\hat{\Omega} &= \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) \int_{4\pi} d\hat{\Omega} = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) (4\pi) = \\ &= \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) \end{aligned}$$

O quinto termo é:

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_P(E) \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} &= \\ = \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_P(E) \int_{4\pi} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \left[\int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' \right] dE' d\hat{\Omega} &= \\ = \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_P(E) \int_{4\pi} d\hat{\Omega} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' &= \\ = (1-\beta) \chi_P(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' & \end{aligned}$$

O sexto termo é:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} = \\
& = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \left[\int_{4\pi} \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' \right] dE' d\hat{\Omega} = \\
& = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} d\hat{\Omega} \int_0^\infty \Sigma_{S_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' = \int_0^\infty \Sigma_{S_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) dE'
\end{aligned}$$

O último termo é:

$$\begin{aligned}
& \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S_1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega} dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} = \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S_1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \\
& \left[\int_{4\pi} \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega}' d\hat{\Omega}' \right] \cdot \hat{\Omega} dE' d\hat{\Omega} = \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \hat{\Omega} d\hat{\Omega} \cdot \int_0^\infty \Sigma_{S_1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \bar{J}(\vec{r}, E', t) dE'
\end{aligned}$$

Onde a integral $\int_{4\pi} \hat{\Omega} d\hat{\Omega}$ é resolvida a seguir:

$$\begin{aligned}
& \int_{4\pi} \hat{\Omega} d\hat{\Omega} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\text{sen}(\theta) \cos(\alpha) \hat{e}_x + \text{sen}(\theta) \text{sen}(\alpha) \hat{e}_y + \cos(\theta) \hat{e}_z) \text{sen}(\theta) d\theta d\alpha = \\
& = \hat{e}_x \int_0^{2\pi} \cos(\alpha) d\alpha \int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 d\theta + \hat{e}_y \int_0^{2\pi} \text{sen}(\alpha) d\alpha \int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 d\theta + \\
& + \hat{e}_z \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi \text{sen}(\theta) \cos(\theta) d\theta = \hat{e}_x [0] \left[\frac{\pi}{2} \right] + \hat{e}_y [0] \left[\frac{\pi}{2} \right] + \hat{e}_z [2\pi] [0] = \vec{0}
\end{aligned}$$

Logo,

$$\frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S_1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega} dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} = 0$$

A equação (2.5) é reescrita:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \bar{J}(\vec{r}, E, t) + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \phi(\vec{r}, E, t) = \int_0^\infty \Sigma_{S_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) \\
& dE' + \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) + (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty v(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE'
\end{aligned} \tag{2.6}$$

A equação (2.2) é integrada no ângulo sólido:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{4\pi} C_i(\vec{r}, t) d\hat{\Omega} = \beta_i \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} - \int_{4\pi} \lambda_i C_i(\vec{r}, t) d\hat{\Omega} \quad (2.7)$$

Onde $i = 1, 2, \dots, N$. O primeiro termo da equação (2.7) é:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{4\pi} C_i(\vec{r}, t) d\hat{\Omega} = \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} \int_{4\pi} d\hat{\Omega} = 4\pi \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

A segundo termo da equação (2.7) é:

$$\begin{aligned} \beta_i \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} &= \beta_i \int_{4\pi} \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \\ \left[\int_{4\pi} \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' \right] dE' d\hat{\Omega} &= \beta_i \int_{4\pi} d\hat{\Omega} \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' = \\ &= 4\pi \beta_i \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' \end{aligned}$$

O último termo da equação (2.7) é:

$$\int_{4\pi} \lambda_i C_i(\vec{r}, t) d\hat{\Omega} = \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \int_{4\pi} d\hat{\Omega} = 4\pi \lambda_i C_i(\vec{r}, t)$$

A equação (2.7) é reescrita:

$$\frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} = \beta_i \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' - \lambda_i C_i(\vec{r}, t) \quad (2.8)$$

A equação (2.4) é substituída na equação (2.1), é feita a multiplicação da equação (2.1) pelo vetor unitário $\hat{\Omega}$ e em seguida integrada no ângulo sólido.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} + \\
& + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^6 \int_{4\pi} \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) \hat{\Omega} \cdot d\hat{\Omega} + \\
& + \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_p(E) \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \hat{\Omega} \cdot v(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} + \\
& + \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \hat{\Omega} \cdot \Sigma_{S0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} + \\
& + \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega} dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega}
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Cada termo da equação (2.9) é resolvido na sequência. As definições das variáveis $\phi(\vec{r}, E, t)$, $\vec{J}(\vec{r}, E, t)$, $\hat{\Omega}$ e $d\hat{\Omega}$ são consideradas.

O primeiro e o terceiro termos da equação (2.9) são:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial}{\partial t} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t}$$

$$\Sigma_t(\vec{r}, E, t) \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \vec{J}(\vec{r}, E, t)$$

O segundo termo da equação (2.9) é:

$$\begin{aligned}
& \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} \cdot \left(\hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} = \\
& = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left(\text{sen}(\theta) \cos(\alpha) \hat{e}_x + \text{sen}(\theta) \text{sen}(\alpha) \hat{e}_y + \cos(\theta) \hat{e}_z \right) \cdot \left(\text{sen}(\theta) \cos(\alpha) \hat{e}_x + \right. \\
& \left. + \text{sen}(\theta) \text{sen}(\alpha) \hat{e}_y + \cos(\theta) \hat{e}_z \right) \left(\hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \right) \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \text{sen}(\theta) d\theta d\alpha = \\
& = \hat{e}_x \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^2 \left[\int_0^\pi \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) (\text{sen}(\theta))^3 d\theta \right] d\alpha + \\
& + \hat{e}_y \frac{\partial}{\partial y} \int_0^{2\pi} (\text{sen}(\alpha))^2 \left[\int_0^\pi \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) (\text{sen}(\theta))^3 d\theta \right] d\alpha + \\
& + \hat{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \int_0^{2\pi} \left[\int_0^\pi \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) (\cos(\theta))^2 \text{sen}(\theta) d\theta \right] d\alpha
\end{aligned}$$

Pode-se considerar a aproximação do fluxo de nêutrons de acordo com a equação (4.131) em DUDERSTADT & HAMILTON [2], ou seja,

$$\phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}, E, t) + \frac{3}{4\pi} \vec{J}(\vec{r}, E, t) \cdot \hat{\Omega}$$

Esta aproximação trata-se da expansão em Harmônicos Esféricos, ou seja, é feita uma expansão do fluxo angular de nêutrons em termos do polinômio de Legendre até o segundo termo, assim a expansão é feita para $l=0$ e $l=1$.

Segue para a componente x:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^2 \left[\int_0^\pi \phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) (\text{sen}(\theta))^3 d\theta \right] d\alpha = \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^2 \left[\int_0^\pi \left(\frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}, E, t) + \frac{3}{4\pi} \vec{J}(\vec{r}, E, t) \cdot \hat{\Omega} \right) (1 - (\cos(\theta))^2) \text{sen}(\theta) d\theta \right] d\alpha = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^2 d\alpha \left[\int_0^\pi \text{sen}(\theta) d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^2 \text{sen}(\theta) d\theta \right] \right\} + \\ &+ \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_x(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^3 d\alpha \left[\int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^2 (\text{sen}(\theta))^2 d\theta \right] \right\} + \\ &+ \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_y(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^2 \text{sen}(\alpha) d\alpha \left[\int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^2 (\text{sen}(\theta))^2 d\theta \right] \right\} + \\ &+ \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_z(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \left\{ \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^2 d\alpha \left[\int_0^\pi \text{sen}(\theta) \cos(\theta) d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^3 \text{sen}(\theta) d\theta \right] \right\} = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ (\pi) \left[2 - \frac{2}{3} \right] \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_x(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ (0) \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{8} \right] \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_y(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ (0) \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{8} \right] \right\} + \\ &+ \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_z(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \left\{ (\pi) [0 - 0] \right\} = \frac{1}{3} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \end{aligned}$$

Segue para a componente y:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial y} \int_0^{2\pi} (\text{sen}(\alpha))^2 \left[\int_0^\pi \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) (\text{sen}(\theta))^3 d\theta \right] d\alpha = \\
& = \frac{\partial}{\partial y} \int_0^{2\pi} (\text{sen}(\alpha))^2 \left[\int_0^\pi \left(\frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}, E, t) + \frac{3}{4\pi} \vec{J}(\vec{r}, E, t) \cdot \hat{\Omega} \right) (1 - (\cos(\theta))^2) \text{sen}(\theta) d\theta \right] d\alpha = \\
& = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ \int_0^{2\pi} (\text{sen}(\alpha))^2 d\alpha \left[\int_0^\pi \text{sen}(\theta) d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^2 \text{sen}(\theta) d\theta \right] \right\} + \\
& + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_x(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ \int_0^{2\pi} (\text{sen}(\alpha))^2 \cos(\alpha) d\alpha \left[\int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^2 (\text{sen}(\theta))^2 d\theta \right] \right\} + \\
& + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_y(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ \int_0^{2\pi} (\text{sen}(\alpha))^3 d\alpha \left[\int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^2 (\text{sen}(\theta))^2 d\theta \right] \right\} + \\
& + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_z(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \left\{ \int_0^{2\pi} (\text{sen}(\alpha))^2 d\alpha \left[\int_0^\pi \text{sen}(\theta) \cos(\theta) d\theta - \int_0^\pi (\cos(\theta))^3 \text{sen}(\theta) d\theta \right] \right\} = \\
& = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ (\pi) \left[2 - \frac{2}{3} \right] \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_x(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ (0) \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{8} \right] \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_y(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ (0) \left[\frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{8} \right] \right\} + \\
& + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_z(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \left\{ (\pi) [0 - 0] \right\} = \frac{1}{3} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial y}
\end{aligned}$$

Segue para a componente z:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial z} \int_0^{2\pi} \left[\int_0^\pi \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) (\cos(\theta))^2 \text{sen}(\theta) d\theta \right] d\alpha = \\
& = \frac{\partial}{\partial z} \int_0^{2\pi} \left[\int_0^\pi \left(\frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}, E, t) + \frac{3}{4\pi} \vec{J}(\vec{r}, E, t) \cdot \hat{\Omega} \right) (\cos(\theta))^2 \text{sen}(\theta) d\theta \right] d\alpha = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \\
& \left\{ \int_0^{2\pi} d\alpha \left[\int_0^\pi (\cos(\theta))^2 \text{sen}(\theta) d\theta \right] \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_x(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ \int_0^{2\pi} \cos(\alpha) d\alpha \int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 (\cos(\theta))^2 d\theta \right\} + \\
& + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_y(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ \int_0^{2\pi} \text{sen}(\alpha) d\alpha \int_0^\pi (\text{sen}(\theta))^2 (\cos(\theta))^2 d\theta \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_z(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \\
& \left\{ \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi \text{sen}(\theta) (\cos(\theta))^3 d\theta \right\} = \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \left\{ (2\pi) \left[\frac{2}{3} \right] \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_x(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \left\{ (0) \left(\frac{\pi}{8} \right) \right\} + \\
& + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_y(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \left\{ (0) \left(\frac{\pi}{8} \right) \right\} + \frac{3}{4\pi} \frac{\partial J_z(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \left\{ (2\pi)(0) \right\} = \frac{1}{3} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial z}
\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} &= \frac{1}{3} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial x} \hat{e}_x + \frac{1}{3} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial y} \hat{e}_y + \frac{1}{3} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial z} \hat{e}_z = \\ &= \frac{1}{3} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) \end{aligned}$$

O quarto termo da equação (2.9) é:

$$\frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^6 \int_{4\pi} \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) \hat{\Omega} \cdot d\hat{\Omega} = \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot d\hat{\Omega} = \vec{0}$$

O quinto termo da equação (2.9) é

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \int_{4\pi} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} = \\ &= \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \left[\int_{4\pi} \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' \right] d\hat{\Omega} dE' = \\ &= \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) [\phi(\vec{r}, E', t)] d\hat{\Omega} dE' = \\ &= \frac{1}{4\pi} (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' \left[\int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot d\hat{\Omega} \right] = \vec{0} \end{aligned}$$

O sexto termo da equação (2.9) é:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \left[\int_{4\pi} \phi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) d\hat{\Omega}' \right] \hat{\Omega} \cdot d\hat{\Omega} dE' = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) [\phi(\vec{r}, E', t)] \hat{\Omega} \cdot d\hat{\Omega} dE' = \\ &= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot d\hat{\Omega} = \vec{0} \end{aligned}$$

O último termo da equação (2.9) é:

$$\begin{aligned}
& \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega} dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} = \frac{3}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \\
& \left[\int_{4\pi} \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega}' d\hat{\Omega}' \right] \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} d\hat{\Omega} dE' = \frac{3}{4\pi} \int_0^\infty \int_{4\pi} \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) [\vec{J}(\vec{r}, E', t)] \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} d\hat{\Omega} dE' = \\
& = \frac{3}{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) dE' \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} d\hat{\Omega}
\end{aligned}$$

Onde,

$$\begin{aligned}
& \int_{4\pi} \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega} d\hat{\Omega} = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\sin(\theta) \cos(\alpha) \hat{e}_x + \sin(\theta) \sin(\alpha) \hat{e}_y + \cos(\theta) \hat{e}_z) \cdot (\sin(\theta) \cos(\alpha) \hat{e}_x + \\
& + \sin(\theta) \sin(\alpha) \hat{e}_y + \cos(\theta) \hat{e}_z) \sin(\theta) d\theta d\alpha = \int_0^{2\pi} (\cos(\alpha))^2 d\alpha \int_0^\pi (\sin(\theta))^3 d\theta + \\
& + \int_0^{2\pi} (\sin(\alpha))^2 d\alpha \int_0^\pi (\sin(\theta))^3 d\theta + \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi (\cos(\theta))^2 \sin(\theta) d\theta = (\pi) \left(\frac{4}{3} \right) + \\
& + (\pi) \left(\frac{4}{3} \right) + (2\pi) \left(\frac{2}{3} \right) = 4\pi
\end{aligned}$$

Logo,

$$\begin{aligned}
& \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega} dE' d\hat{\Omega}' d\hat{\Omega} = \\
& = 3 \int_0^\infty \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) dE'
\end{aligned}$$

A equação (2.9) é reescrita como:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \frac{1}{3} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \vec{J}(\vec{r}, E, t) = \\
& = 3 \int_0^\infty \Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) dE'
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Para simplificar a equação (2.10) a seguinte aproximação é considerada:

$$\Sigma_{S1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \cong \Sigma_{S1}(\vec{r}, E', t) \delta(E' - E)$$

Logo,

$$\begin{aligned} 3 \int_0^{\infty} \Sigma_{s1}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) dE' &= 3 \int_0^{\infty} \Sigma_{s1}(\vec{r}, E', t) \vec{J}(\vec{r}, E', t) \delta(E' - E) dE' = \\ &= 3 \Sigma_{s1}(\vec{r}, E, t) \vec{J}(\vec{r}, E, t) \end{aligned}$$

Definindo a seção de choque de transporte,

$$\Sigma_{TR}(\vec{r}, E, t) \equiv \Sigma_t(\vec{r}, E, t) - 3 \Sigma_{s1}(\vec{r}, E, t)$$

A equação (2.10) pode ser reescrita:

$$\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \Sigma_{TR}(\vec{r}, E, t) \vec{J}(\vec{r}, E, t) = -\frac{1}{3} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) \quad (2.11)$$

Note que as equações (2.6), (2.8) e (2.11) foram obtidas a partir das equações de transporte (2.1) e (2.2), mas não dependem da direção do deslocamento dos nêutrons e são chamadas de equações da cinética espacial com a aproximação P1 e ainda com dependência energética. Elas serão utilizadas para a dedução de dois conjuntos de equações para cinética pontual: as clássicas e as modificadas.

Define-se o coeficiente de difusão:

$$D(\vec{r}, E, t) \equiv \frac{1}{3 \Sigma_{TR}(\vec{r}, E, t)}$$

A equação (2.11) é dividida pela seção de choque de transporte:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E) \Sigma_{TR}(\vec{r}, E, t)} \frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \vec{J}(\vec{r}, E, t) &= -\frac{1}{3 \Sigma_{TR}(\vec{r}, E, t)} \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) \\ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \vec{J}(\vec{r}, E, t) &= -D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) \end{aligned} \quad (2.12)$$

O primeiro termo da equação (2.12) é considerado desprezível em relação aos outros termos, ou seja, é feita a aproximação para a derivada da corrente de nêutrons. A equação (2.12) é reescrita:

$$\vec{J}(\vec{r}, E, t) = -D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) \quad (2.13)$$

A equação (2.13) é bastante frequente na Física e conhecida na área como Lei de Fick. A metodologia empregada para obter as Equações da Cinética Pontual Clássica a partir das equações (2.6), (2.8) e (2.13) é muito similar àquele usado para obter as Equações da Cinética Pontual modificada. Por simplicidade as equações são apresentadas sem uma dedução formal:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho(t) - \beta(t))}{\Lambda(t)} n(t) + \sum_{i=1}^N \lambda_i \cdot C_i(t) \quad (2.14)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i(t)}{\Lambda(t)} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad (2.15)$$

Onde $i = 1, 2, \dots, N$

Os parâmetros apresentados nas equações (2.14) e (2.15) são definidos a seguir:

$$\Lambda(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) f(\vec{r}, E) dE d^3r = \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dE d^3r \quad (2.16)$$

$$\beta_i(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \beta_i \chi_i(E) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) f(\vec{r}, E') dE' dE d^3r \quad (2.17)$$

$$\beta(t) \equiv \sum_{i=1}^N \beta_i(t) = \frac{1}{I_F} \sum_{i=1}^N \int_V \int_0^\infty \beta_i \chi_i(E) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) f(\vec{r}, E') dE' dE d^3r \quad (2.18)$$

$$\rho(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left[-\delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \nu(E) f(\vec{r}, E) + \int_0^\infty \left\{ (1 - \beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right\} \nu(E') \delta \Sigma_f(\vec{r}, E', t) + \delta \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \right] \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' dE d^3r \quad (2.19)$$

Note que, pela equação (2.16), segue:

$$f(\vec{r}, E) = \chi_i(E) g_i(\vec{r})$$

As Equações da Cinética Pontual Clássica, equações (2.14) e (2.15) são muito utilizadas na área de Física de Reatores e este modelo é deduzido em DUDERSTADT & HAMILTON [2], HETRICK [24], AKCASU, LELLOUCHE & SNOTKIN [25].

2.2 A Validade das Equações da Cinética Pontual Clássica

Algumas aproximações foram consideradas no modelo da cinética pontual, da mesma forma que em NUNES [5]. Foi considerado que o fluxo de nêutrons e a concentração de precursores podem ser definidos a partir das equações

$$-\vec{\nabla} \left[D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t_0) \right] + \Sigma_t(\vec{r}, E, t_0) \phi(\vec{r}, E, t_0) = \int_0^{\infty} \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' + (1 - \beta) \chi_p(E) \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' + \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t_0) \quad (2.20)$$

$$\lambda_i C_i(\vec{r}, t_0) = \beta_i \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' \quad (2.21)$$

que foram definidas para um reator homogêneo, permitindo a separação de variáveis e a obtenção de equações que são totalmente independentes da posição. Esta hipótese de separação de variáveis só é possível se a variação da densidade de nêutrons ao longo do tempo em cada ponto do reator nuclear for a mesma, ou seja, independente da posição. Considera-se também que todos os nêutrons possuem a mesma energia, ou seja, a equação de difusão que foi deduzida a partir da equação de transporte é monoenergética.

Note que a dependência espacial dos parâmetros nucleares não surge na apresentação final das equações porque as seções de choque e o coeficiente de difusão são redefinidos em termos de $\rho(t)$ (reatividade) e Λ (tempo médio de geração de nêutrons). A constante de decaimento radioativo de cada grupo de precursores (λ_i) e o percentual de nêutrons retardados para grupo de precursores (β_i) são parâmetros nucleares que são considerados constantes para cada ponto do espaço de acordo com DUDERSTADT & HAMILTON [2] e HETRICK [24].

Outra aproximação que foi feita consiste no desprezo do efeito de realimentação termohidráulica. A densidade de nêutrons é proporcional à potência nuclear que por sua vez é proporcional ao calor removido do núcleo do reator nuclear. Para levar em conta este efeito termodinâmico a reatividade não seria apenas uma função do tempo, mas também uma função da própria densidade de nêutrons o que transformaria as equações da cinética pontual em

equações diferenciais não-lineares de solução analítica improvável. Seria um modelo dinâmico e não mais cinético.

A mudança na composição do núcleo do reator é considerada muito mais lenta do que o tempo característico do modelo da cinética pontual e, portanto, os parâmetros nucleares, exceto a reatividade, são considerados independentes do tempo.

Para que fossem obtidos os valores homogeneizados das seções de choque de absorção, de fissão, de transferência de nêutrons e do coeficiente de difusão foi realizado um processo de homogeneização do reator nuclear a partir da equação espacial da difusão de nêutrons, ou seja, a equação obtida após a separação de variáveis, qual seja:

$$D \cdot \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + \left((1 - \beta) \nu \Sigma_f - \Sigma_a \right) \cdot \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.22)$$

Levando em conta as condições de criticalidade pode-se identificar o chamado buckling geométrico pela solução equação (2.23) que corresponde a um problema de autovalores:

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + B_g^2 \cdot \Psi(\vec{r}) = 0 \quad (2.23)$$

Cuja solução para um reator tipo slab, será:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_0 \cdot \cos\left(\frac{n\pi}{\tilde{a}} x\right) \quad (2.24)$$

Logo,

$$B_g = \frac{\left((1 - \beta) \nu \Sigma_f - \Sigma_a \right)}{D} = \frac{n\pi}{\tilde{a}} \quad (2.25)$$

Note que B_g^2 é o autovalor da equação (2.23). Na condição de criticalidade ele pode ser definido pela equação (2.25). As definições dos parâmetros cinéticos que dependem direta ou indiretamente do buckling geométrico são o tempo médio de vida do nêutron no reator nuclear, o tempo médio entre a geração do nêutron e a absorção que produz fissão nuclear e a própria reatividade porque os parâmetros que aparecem na equação (2.25) os definem de acordo com as equações (2.16) até (2.19). Assim, o modelo da cinética pontual clássica é dependente da resolução do problema de autovalores para a dependência espacial do fluxo de nêutrons.

Desta forma, os limites de validade do modelo da cinética pontual são explicitamente estabelecidos a partir da compreensão das diversas aproximações consideradas. Note que a aproximação dada pela equação (2.13) não é relevante para a consistência do modelo e permite apenas uma simplificação da equação da difusão monoenergética com a obtenção da chamada Lei de Fick.

3. A Obtenção das Equações da Cinética Pontual Modificada

Para obter as equações da cinética pontual modificada a aproximação conhecida como Lei de Fick não será considerada. O cálculo que se segue inicia com a aplicação do operador divergente na equação (2.12), obtendo-se:

$$\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t) = -\vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t)] \quad (3.1)$$

A seguir deriva-se a equação (2.6) com relação ao tempo e multiplica-se por $\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)}$

obtendo-se:

$$\begin{aligned} & \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{(v(E))^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} + \frac{3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \\ & + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E, t) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t} = \\ & = \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} dE' + \\ & + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \frac{\partial \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \\ & + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} + \\ & + (1-\beta) \chi_p(E) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \nu(E') \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \\ & + (1-\beta) \chi_p(E) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} dE' \end{aligned} \quad (3.2)$$

Soma-se a equação (2.6) com a equação (3.2).

$$\begin{aligned}
& \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t) + \\
& + \frac{1+3D(\vec{r}, E, t)\Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right\} \phi(\vec{r}, E, t) = \\
& = \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} dE' \\
& + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \frac{\partial \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' \\
& + (1-\beta) \chi_p(E) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \nu(E') \left\{ \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) + \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right\} dE' + \\
& + (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t)
\end{aligned} \tag{3.3}$$

Substitui-se a equação (3.1) na equação (3.3), obtendo-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} - \vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t)] + \frac{1+3D(\vec{r}, E, t)\Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \\
& \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right\} \phi(\vec{r}, E, t) = \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} + \\
& + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} dE' + \\
& + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \frac{\partial \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \int_0^\infty \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \\
& + (1-\beta) \chi_p(E) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \nu(E') \left\{ \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) + \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right\} dE' + \\
& + (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE'
\end{aligned} \tag{3.4}$$

A equação (3.4) envolve apenas o fluxo de nêutrons e a concentração de precursores. Juntamente com a equação (2.8) formam o conjunto das equações da cinética espacial em difusão sem a aproximação da Lei de Fick. A partir destas equações da cinética espacial é possível obter as equações da cinética pontual usando o fluxo de nêutrons adjunto.

Considera-se que o reator nuclear estava operando em regime estacionário até o instante t_0 , logo:

$$\frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} = 0, \quad \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} = 0,$$

$$\frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} = 0 \text{ e } \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} = 0 \text{ para } t \leq t_0$$

Assim, a partir das equações (3.8) e (4.4) segue:

$$\lambda_i C_i(\vec{r}, t_0) = \beta_i \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' \quad (3.5)$$

$$-\vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t_0)] + \Sigma_t(\vec{r}, E, t_0) \phi(\vec{r}, E, t_0) = \int_0^\infty \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' +$$

$$+(1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' + \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t_0) \quad (3.6)$$

Substitui-se a equação (3.5) na equação (3.6):

$$-\vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t_0)] + \Sigma_t(\vec{r}, E, t_0) \phi(\vec{r}, E, t_0) = (1-\beta) \chi_p(E)$$

$$\int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' + \int_0^\infty \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' +$$

$$+ \sum_{i=1}^N \chi_i(E) \beta_i \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi(\vec{r}, E', t_0) dE' \quad (3.7)$$

A equação adjunta da equação (3.7), em regime estacionário, é apresentada:

$$-\vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi^*(\vec{r}, E, t_0)] + \Sigma_t(\vec{r}, E, t_0) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) = (1-\beta) \chi_p(E)$$

$$\int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi^*(\vec{r}, E', t_0) dE' + \int_0^\infty \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t_0) \phi^*(\vec{r}, E', t_0) dE' +$$

$$+ \sum_{i=1}^N \chi_i(E) \beta_i \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi^*(\vec{r}, E', t_0) dE' \quad (3.8)$$

Agora, soma-se e subtrai-se o termo:

$$\sum_{i=1}^N \chi_i(E) \beta_i \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE'$$

no lado direito da equação (3.4).

$$\begin{aligned}
& \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{(v(E))^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} - \vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t)] + \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{v(E)} + \frac{1}{v(E)} \right\} \\
& \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right\} \phi(\vec{r}, E, t) = \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \\
& \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} dE' + \\
& \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \frac{\partial \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \int_0^\infty \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \\
& (1-\beta) \chi_p(E) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^\infty \nu(E') \left\{ \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) + \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right\} dE' + \\
& + \int_0^\infty \left((1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' + \\
& - \sum_{i=1}^6 \int_0^\infty \beta_i \chi_i(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE'
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Multiplica-se a equação (3.9) pelo fluxo de nêutrons adjunto $\phi^*(\vec{r}, E, t_0)$ e em seguida integra-se no volume e na energia E .

$$\begin{aligned}
& \int \int_V \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{(v(E))^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} dEd^3r + \\
& - \int \int_V \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t)] dEd^3r + \\
& + \int \int_V \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{v(E)} + \frac{1}{v(E)} \right\} \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} dEd^3r + \\
& \int \int_V \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right\} \phi(\vec{r}, E, t) dEd^3r = \\
& = \int \int_V \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} dEd^3r + \\
& + \sum_{i=1}^6 \int \int_V \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) dEd^3r +
\end{aligned} \tag{3.10}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} dE' dE d^3r + \\
& + \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) dE' dE d^3r + \\
& + \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' dE d^3r + \\
& + \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) (1-\beta) \chi_p(E) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \nu(E') \left\{ \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \phi(\vec{r}, E', t) + \right. \\
& \left. + \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right\} dE' dE d^3r + \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left((1-\beta) \chi_p(E) + \right. \\
& \left. \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' dE d^3r + \\
& - \sum_{i=1}^6 \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \beta_i \chi_i(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' dE d^3r
\end{aligned}$$

Agora multiplica-se a equação (3.8) por $\phi(\vec{r}, E, t)$ e integra-se no volume e na energia E .

$$\begin{aligned}
& - \int_V \int_0^\infty \phi(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \cdot \left[D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \right] dE d^3r + \int_V \int_0^\infty \phi(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t_0) \\
& \phi^*(\vec{r}, E, t_0) dE d^3r = \int_V \int_0^\infty (1-\beta) \chi_p(E) \int_0^\infty \phi(\vec{r}, E, t) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \\
& \phi^*(\vec{r}, E', t_0) dE' dE d^3r + \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi(\vec{r}, E, t) \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t_0) \phi^*(\vec{r}, E', t_0) dE' dE d^3r + \\
& + \sum_{i=1}^N \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi(\vec{r}, E, t) \chi_i(E) \beta_i \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi^*(\vec{r}, E', t_0) dE' dE d^3r
\end{aligned} \tag{3.11}$$

A equação (3.11) pode ser reescrita:

$$\begin{aligned}
& \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \int_0^\infty \left[\Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t_0) + \left((1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \chi_i(E) \beta_i \right) \nu(E') \right. \right. \\
& \left. \left. \Sigma_f(\vec{r}, E', t_0) \phi(\vec{r}, E', t) \right] dE' - \Sigma_t(\vec{r}, E, t_0) \phi(\vec{r}, E, t) \right\} dE d^3r + \\
& + \int_V \int_0^\infty \phi(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \cdot \left[D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \right] dE d^3r = 0
\end{aligned} \tag{3.12}$$

A equação (3.10) é reescrita:

$$\begin{aligned}
& \int \int_{\mathbf{v} > 0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{(\mathbf{v}(E))^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} + \left[\frac{3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\mathbf{v}(E)} + \frac{1}{\mathbf{v}(E)} \right] \right. \\
& \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \left. \left[\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{\mathbf{v}(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right] \phi(\vec{r}, E, t) + \right. \\
& \left. - \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) - \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{\mathbf{v}(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} \right\} dE d^3 r + \\
& - \int \int_{\mathbf{v} > 0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \cdot \left[D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) \right] dE d^3 r + \\
& + \int \int_{\mathbf{v} > 0}^{\infty} \int_{\mathbf{v}' > 0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{\mathbf{v}(E)} \left[-\Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) - \right. \right. \\
& \left. \left. (1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right] \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} + \right. \\
& \left. + \left[-\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{\mathbf{v}(E)} \left(\frac{\partial \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} + (1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right) + \right. \right. \\
& \left. \left. - \left((1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) - \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) + \right. \right. \\
& \left. \left. + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right] \phi(\vec{r}, E', t) \right\} dE' dE d^3 r = 0
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Subtrai-se a equação (3.12) da equação (3.13) obtendo-se:

$$\begin{aligned}
& \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} + \left[\frac{3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{v(E)} + \frac{1}{v(E)} \right] \right. \\
& \left. \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \left[\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right] \phi(\vec{r}, E, t) + \right. \\
& \left. - \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) - \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} \right\} dE d^3 r + \\
& + \int_V \int_0^\infty \left\{ \phi(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi^*(\vec{r}, E, t_0)] - \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \right. \\
& \left. \vec{\nabla} \cdot [D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t)] \right\} dE d^3 r + \int_V \int_0^\infty \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \\
& \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} [-\Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) - (1-\beta) \chi_P(E) v(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t)] \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} + \right. \\
& + \left[-\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \left(\frac{\partial \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} + (1-\beta) \chi_P(E) v(E') \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right) + \right. \\
& - \left((1-\beta) \chi_P(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right) v(E') \delta \Sigma_f(\vec{r}, E', t) - \delta \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) + \\
& \left. + \sum_{i=1}^6 \beta_i \chi_i(E) v(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right\} \phi(\vec{r}, E', t) \Big\} dE' dE d^3 r = 0
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Onde define-se:

$$\delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \equiv \Sigma_t(\vec{r}, E, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E, t_0)$$

$$\delta \Sigma_f(\vec{r}, E, t) \equiv \Sigma_f(\vec{r}, E, t) - \Sigma_f(\vec{r}, E, t_0)$$

$$\delta \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E, t) \equiv \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E, t) - \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E, t_0)$$

Considera-se que o fluxo de nêutrons no contorno do volume V é nulo, ou seja, o volume V é contornado por uma superfície fechada S onde o fluxo de nêutrons é nulo. A partir daí, o segundo termo da equação (3.14) é calculado supondo-se que o coeficiente de difusão varia muito pouco em relação a posição ao longo do tempo:

$$\begin{aligned}
& \int \int_{v_0}^{\infty} \left\{ \phi(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \cdot \left[D(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \right] - \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \vec{\nabla} \cdot \left[D(\vec{r}, E, t) \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, t) \right] \right\} dEd^3r = \\
& = -D(\vec{r}, E, t_0) \int \int_{v_0}^{\infty} \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \left[\phi(\vec{r}, E, t) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \right] dEd^3r = \\
& = -D(\vec{r}, E, t_0) \int \int_{s_0}^{\infty} \hat{e}_s \cdot \vec{\nabla} \left[\phi(\vec{r}, E, t) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \right] dEds = 0
\end{aligned}$$

Assim, a equação (3.14) pode ser reescrita:

$$\begin{aligned}
& \int \int_{v_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{(v(E))^2} \frac{\partial^2 \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t^2} + \left[\frac{3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{v(E)} + \frac{1}{v(E)} \right] \right. \\
& \frac{\partial \phi(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \left. \left[\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} + \delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \right] \phi(\vec{r}, E, t) + \right. \\
& \left. - \sum_{i=1}^6 \lambda_i \chi_i(E) C_i(\vec{r}, t) - \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \sum_{i=1}^N \lambda_i \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} \right\} dEd^3r + \int \int \int_{v_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \\
& \left\{ \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \left[-\Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) - (1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right] \frac{\partial \phi(\vec{r}, E', t)}{\partial t} + \right. \\
& \left. + \left[-\frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \left(\frac{\partial \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} + (1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right) + \right. \right. \\
& \left. - \left((1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right) \nu(E') \delta \Sigma_f(\vec{r}, E', t) - \delta \Sigma_{s_0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) + \right. \\
& \left. + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right] \phi(\vec{r}, E', t) \left. \right\} dE' dEd^3r
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Considera-se a aproximação que permite a separação de variáveis, qual seja,

$$\begin{aligned}
\phi(\vec{r}, E, t) &= v(E) n(t) f(\vec{r}, E) \\
C_i(\vec{r}, t) &= C_i(t) g_i(\vec{r})
\end{aligned} \tag{3.16}$$

As aproximações da equação (3.16) são utilizadas na equação (3.15):

$$\begin{aligned}
& \left[\int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} f(\vec{r}, E) dEd^3r \right] \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left[\int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) f(\vec{r}, E) dEd^3r \right] \frac{dn(t)}{dt} + \\
& + \left[\int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ 3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t) f(\vec{r}, E) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^{\infty} [-\Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) + \right. \right. \\
& \left. \left. -(1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t)] v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dEd^3r \right] \frac{dn(t)}{dt} \\
& \left[\int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left[\delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) v(E) f(\vec{r}, E) - \int_0^{\infty} \left\{ (1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right\} \nu(E') \delta \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right. \right. \\
& \left. \left. - \delta \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right\} v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right] dEd^3r \right] n(t) \\
& \left[\int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \left[\frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} v(E) f(\vec{r}, E) \right. \right. \\
& \left. \left. - \int_0^{\infty} \left\{ (1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} + \frac{\partial \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} \right\} v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right] dEd^3r \right] \\
& n(t) - \sum_{i=1}^N \lambda_i C_i(t) \left[\int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dEd^3r \right] - \sum_{i=1}^N \lambda_i \frac{dC_i(\vec{r}, t)}{dt} \\
& \left[\int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dEd^3r \right] = 0
\end{aligned} \tag{3.17}$$

É possível considerar que as derivadas temporais das seções de choque são bem menores que os outros termos da equação (3.17). Isso implica diretamente:

$$\begin{aligned}
0 = & \int_{\mathbf{v}_0}^{\infty} \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ 3D(\vec{r}, E, t) \frac{\partial \Sigma_t(\vec{r}, E, t)}{\partial t} f(\vec{r}, E) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^{\infty} \left[-\frac{\partial \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t)}{\partial t} \right. \right. \\
& \left. \left. -(1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \frac{\partial \Sigma_f(\vec{r}, E', t)}{\partial t} \right] v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dEd^3r
\end{aligned} \tag{3.18}$$

A equação (3.17) é reescrita:

$$\begin{aligned}
& \left[\int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} f(\vec{r}, E) dEd^3r \right] \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left[\int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) f(\vec{r}, E) dEd^3r \right] \frac{dn(t)}{dt} + \\
& + \left[\int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ 3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t) f(\vec{r}, E) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \int_0^{\infty} [-\Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) + \right. \right. \\
& \left. \left. -(1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t)] v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dEd^3r \right] \frac{dn(t)}{dt} \\
& \left[\int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left[\delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) v(E) f(\vec{r}, E) - \int_0^{\infty} \left\{ \left((1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right) \nu(E') \delta \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right. \right. \right. \\
& \left. \left. - \delta \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right\} v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right] dEd^3r \right] n(t) \\
& - \sum_{i=1}^N \lambda_i C_i(t) \left[\int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dEd^3r \right] - \sum_{i=1}^N \lambda_i \frac{dC_i(\vec{r}, t)}{dt} \\
& \left[\int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dEd^3r \right] = 0 \tag{3.19}
\end{aligned}$$

Divide-se a equação (3.19) pela integral definida abaixo:

$$\begin{aligned}
I_F \equiv \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^{\infty} \left[(1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right] \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) v(E') \\
f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r \tag{3.20}
\end{aligned}$$

Para chegarmos a equação da cinética pontual modificada, segue:

$$\begin{aligned}
& \left[\frac{\Lambda}{f_D} \right] \frac{d^2n(t)}{dt^2} + [\Lambda] \frac{dn(t)}{dt} + \left[\frac{f_A \Lambda}{f_D} - \frac{1}{f_D} + \frac{\beta}{f_D} \right] \frac{dn(t)}{dt} + [-\rho + \beta] n(t) \\
& - [\Lambda] \sum_{i=1}^N \lambda_i C_i(t) - \left[\frac{\Lambda}{f_D} \right] \sum_{i=1}^N \lambda_i \frac{dC_i(\vec{r}, t)}{dt} = 0 \tag{3.21}
\end{aligned}$$

Os parâmetros apresentados na equação (3.21) são definidos a seguir:

$$\Lambda(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) f(\vec{r}, E) dEd^3r$$

$$\beta_i(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int_{V_0}^{\infty} \beta_i \chi_i(E) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r$$

$$\beta(t) \equiv \sum_{i=1}^N \beta_i(t) = \frac{1}{I_F} \sum_{i=1}^N \int_{V_0}^{\infty} \beta_i \chi_i(E) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^{\infty} \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r$$

$$\rho(t) \equiv \frac{1}{I_F \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0)} \left[-\delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) v(E) f(\vec{r}, E) + \int_0^{\infty} \left\{ (1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^N \beta_i \chi_i(E) \right\} \right. \\ \left. v(E') \delta \Sigma_f(\vec{r}, E', t) + \delta \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \right] v(E') f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r$$

$$\frac{1}{f_D(t)} \equiv \frac{1}{\Lambda(t) I_F \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0)} \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} f(\vec{r}, E) dEd^3r$$

$$\frac{f_A(t) \Lambda(t)}{f_D(t)} - \frac{1}{f_D(t)} + \frac{\beta(t)}{f_D(t)} \equiv \frac{1}{I_F \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0)} \left\{ 3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t) f(\vec{r}, E) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \right. \\ \left. \int_0^{\infty} \left[-\Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) - (1-\beta) \chi_p(E) v(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right] v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dEd^3r$$

$$f_A(t) \equiv \frac{1-\beta(t)}{\Lambda(t)} + \frac{f_D(t)}{\Lambda(t) I_F \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0)} \left\{ 3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t) f(\vec{r}, E) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \right. \\ \left. \int_0^{\infty} \left[-\Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) - (1-\beta) \chi_p(E) v(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right] v(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dEd^3r$$

$$\Lambda(t) \equiv \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dEd^3r$$

$$\frac{1}{f_D(t)} \equiv \frac{1}{\Lambda(t) I_F \int_{V_0}^{\infty} \phi^*(\vec{r}, E, t_0)} \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{v(E)} \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dEd^3r$$

Note que a partir das diferentes definições acima de $\Lambda(t)$ pode-se verificar, ao fazer a comparação entre elas, que:

$$f(\vec{r}, E) = \chi_i(E) g_i(\vec{r})$$

O mesmo resultado é obtido ao fazer a comparação entre as diferentes definições de $\frac{1}{f_D(t)}$.

A equação (3.21) é reescrita:

$$\frac{1}{f_D(t)} \cdot \frac{d^2 n(t)}{dt^2} + \left(1 + \frac{f_A(t)}{f_D(t)} - \frac{1}{f_D(t)} \frac{(1-\beta(t))}{\Lambda(t)} \right) \cdot \frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho(t) - \beta(t))}{\Lambda(t)} \cdot n(t) + \sum_{i=1}^N \lambda_i \cdot C_i(t) + \frac{1}{f_D(t)} \cdot \sum_{i=1}^N \lambda_i \cdot \frac{dC_i(t)}{dt} \quad (3.22)$$

Para a obtenção da equação dos precursores o procedimento consiste em multiplicar a equação (2.8) pelo fluxo de nêutrons adjunto $\phi^*(\vec{r}, E, t_0)$ e por $\chi_i(E)$ e em seguida e integra-se no volume e na energia E .

$$\int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) \frac{\partial C_i(\vec{r}, t)}{\partial t} dEd^3r = \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \beta_i \chi_i(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \phi(\vec{r}, E', t) dE' dEd^3r - \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) \lambda_i C_i(\vec{r}, t) dEd^3r \quad (3.23)$$

Usando a separação de variáveis da equação (3.16) segue:

$$\left[\int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) g_i(\vec{r}) dEd^3r \right] \frac{dC_i(t)}{dt} = \left[\int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \beta_i \chi_i(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r \right] n(t) - \left[\int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \chi_i(E) \lambda_i g_i(\vec{r}) dEd^3r \right] C_i(t) \quad (3.24)$$

A equação (3.24) resulta na equação (2.15) relativa a concentração dos precursores. Juntamente com a equação (3.22) são as Equações da Cinética Pontual Modificada.

4. Análise da Aproximação Referente à Derivada da Corrente de Nêutrons

A aproximação referente à derivada do logaritmo da corrente de nêutrons foi considerada na dedução das equações da cinética pontual realizada no Capítulo 2, sendo considerado que:

$$\frac{1}{J(\vec{r},t)} \frac{\partial J(\vec{r},t)}{\partial t} < v \cdot \Sigma_t(\vec{r}) \quad (4.1)$$

Note que a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons é:

$$\frac{\partial \log[J(\vec{r},t)]}{\partial t} = \frac{1}{J(\vec{r},t)} \frac{\partial J(\vec{r},t)}{\partial t} \quad (4.2)$$

Pode-se chamar simplesmente de aproximação referente à derivada da Corrente de Nêutrons, como fica evidente na equação (4.2).

Segundo DUDERSTADT & HAMILTON [2] a frequência de colisões assume um valor típico aproximadamente igual a 10^5 s^{-1} . A aproximação é válida para variações relativamente suaves na corrente de nêutrons. Não seria válida para variações bruscas na corrente de nêutrons.

A equação (2.8) pode ser re-arrumada como se segue:

$$\frac{1}{J(\vec{r},t)} \frac{\partial J(\vec{r},t)}{\partial t} + v \Sigma_t(\vec{r}) = -\frac{v}{3J(\vec{r},t)} \nabla \phi(\vec{r},t) + 3vS_1(\vec{r},t) \quad (4.3)$$

Note que na equação (4.3) a derivada da corrente de nêutrons é comparada diretamente com a frequência de colisões. Na equação (2.11) a comparação é feita com a frequência da interação de transferência de nêutrons e não com a frequência de colisões. A frequência da interação de transferência de nêutrons é aproximadamente igual a 10^4 s^{-1} , ou seja, é menor que a frequência de colisões o que torna a aproximação ainda mais grosseira.

As perguntas a seguir podem ser feitas: Até que ponto a aproximação referente à derivada da corrente de nêutrons pode ser considerada válida? Esta aproximação é fundamental para a obtenção de uma equação para a cinética pontual?

O modelo da cinética pontual consiste em tratar também dos casos de variações bruscas na corrente de nêutrons e através de uma consideração qualitativa pode-se avaliar que em aplicações usuais deste modelo a aproximação referente a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons deve ser relevante. A motivação deste trabalho consiste exatamente em analisar quantitativamente a relevância desta aproximação.

No Capítulo 3 foi feita a dedução das Equações da Cinética Pontual Modificada, onde ao invés de se utilizar a equação (2.13), comumente chamada de Lei de Fick, foi adotada a equação (2.12) que também relaciona a corrente de nêutrons com o fluxo de nêutrons. Todo o cálculo desenvolvido ao longo do capítulo busca a obtenção de um sistema de equações com dependência apenas temporal visando a solução do problema fundamental em um reator nuclear: obter informações acerca da densidade dos nêutrons no núcleo do reator.

A equação obtida como resultado destes cálculos, ou seja, a equação (3.22) trata-se de uma equação diferencial de segunda ordem acoplada com N equações diferenciais de primeira ordem, equação (2.15), onde as variáveis são: a densidade de nêutrons ($\mathbf{n}(t)$) e a concentração dos precursores ($\mathbf{C}_i(t)$). As equações serão lineares ou não-lineares em virtude principalmente da variação temporal dos parâmetros cinéticos. Seguramente a reatividade é o parâmetro que apresenta maior variação temporal em comparação com os demais parâmetros.

Segundo JAHANBIN & MALMIR [26], o cálculo dos parâmetros cinéticos é feito a partir das equações da cinética espacial em regime estacionário. Nesta tese, as equações correspondentes são as equações (3.5) e (3.6), que resultam diretamente na equação (3.7) e que por sua vez tem como equação adjunta a equação (3.8). Estas quatro equações são as mesmas que resultam do uso das equações (2.6) e (2.8) em conjunto com a equação (2.13) (Lei de Fick), ou seja, as equações da cinética espacial em regime estacionário são idênticas para o modelo da Cinética Pontual Clássica em comparação com a Cinética Pontual Modificada. Isso implica que os parâmetros cinéticos comuns às Cinéticas Clássica e Modificada são os mesmos, ou seja, as definições abaixo são comuns aos dois modelos.

$$\Lambda(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) f(\vec{r}, E) dE d^3r \quad (4.4)$$

$$\beta_i(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int_V \int_0^\infty \beta_i \chi_i(E) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) f(\vec{r}, E') dE' dE d^3r \quad (4.5)$$

$$\beta(t) \equiv \sum_{i=1}^6 \beta_i(t) = \frac{1}{I_F} \sum_{i=1}^6 \int \int_{V_0} \beta_i \chi_i(E) \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r \quad (4.6)$$

$$\rho(t) \equiv \frac{1}{I_F} \int \int_{V_0} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left[-\delta \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \nu(E) f(\vec{r}, E) + \int_0^\infty \left\{ (1-\beta) \chi_p(E) + \sum_{i=1}^6 \beta_i \chi_i(E) \right\} \nu(E') \delta \Sigma_f(\vec{r}, E', t) + \delta \Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) \right] \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r \quad (4.7)$$

O problema consiste no cálculo dos parâmetros que aparecem apenas na Cinética Pontual Modificada, quais sejam a frequência de difusão de nêutrons e a frequência de absorção de nêutrons, respectivamente definidos a baixo:

$$\frac{1}{f_D(t)} \equiv \frac{1}{\Lambda(t) I_F} \int \int_{V_0} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{\nu(E)} f(\vec{r}, E) dEd^3r \quad (4.8)$$

$$f_A(t) = \frac{1-\beta(t)}{\Lambda(t)} + \frac{f_D(t)}{\Lambda(t) I_F} \int \int_{V_0} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ 3D(\vec{r}, E, t) \Sigma_t(\vec{r}, E, t) f(\vec{r}, E) + \frac{3D(\vec{r}, E, t)}{\nu(E)} \int_0^\infty \left[-\Sigma_{s0}(\vec{r}, E' \rightarrow E, t) - (1-\beta) \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \right] \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dEd^3r \quad (4.9)$$

Em geral, os cálculos dos parâmetros cinéticos envolvem o uso da equação adjunta da equação estacionária (3.8) para se obter o fluxo de nêutrons adjunto $\phi^*(\vec{r}, E, t_0)$ e das próprias equações (3.5) e (3.6) para a obtenção do fluxo de nêutrons estacionário $f(\vec{r}, E)$. Um procedimento mais formal para este cálculo é descrito em HENRY [3].

A variação do coeficiente de difusão em um reator homogêneo em termos de posição e energia pode evidentemente ser considerada desprezível, ou seja, o coeficiente de difusão pode ser considerado como invariável na equação (4.8). A velocidade dos nêutrons também será considerada constante no caso do reator ser homogêneo. Assim a equação (4.8) pode ser reescrita.

$$\frac{1}{f_D(t)} = \frac{3D}{\nu} \frac{1}{\Lambda(t) I_F} \int \int_{V_0} \phi^*(\vec{r}, E, t_0) f(\vec{r}, E) dEd^3r \quad (4.10)$$

Comparando a equação (4.10) com a equação (4.4) segue que:

$$\frac{1}{f_D} = \frac{3D}{\nu} \quad (4.11)$$

Obtemos assim a frequência de difusão ou frequência de transferência de nêutrons em termos de parâmetros calculados para reatores homogêneos.

$$f_D = \frac{v}{3D} = v \Sigma_{TR} \quad (4.12)$$

Aplicando a mesma idéia de considerar que o núcleo do reator seja aproximadamente homogêneo é possível reescrever a equação (4.9):

$$\begin{aligned} f_A(t) = & \frac{(1-\beta)}{\Lambda} + f_D 3D \Sigma_t \frac{1}{\Lambda I_F} \int_0^\infty \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) f(\vec{r}, E) dE d^3r + \\ & - f_D \frac{3D}{v} v \Sigma_{S0} \frac{1}{\Lambda I_F} \int_0^\infty \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^\infty f(\vec{r}, E') dE' dE d^3r + \\ & - \frac{f_D}{\Lambda I_F} \frac{3D}{v} (1-\beta) \int_0^\infty \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \int_0^\infty \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dE d^3r \end{aligned} \quad (4.13)$$

Note que as seções de choque e demais coeficientes são considerados constantes. A partir da substituição das equações (4.4) e (4.12) na equação (4.13), segue que:

$$\begin{aligned} f_A(t) = & \frac{(1-\beta)}{\Lambda} + v(\Sigma_t - \Sigma_{S0}) + \\ & - \frac{1}{\Lambda I_F} (1-\beta) \int_0^\infty \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \int_0^\infty \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dE d^3r \end{aligned} \quad (4.14)$$

A equação (4.14) pode ser reescrita:

$$\begin{aligned} f_A(t) = & \frac{(1-\beta)}{\Lambda I_F} \left[I_F - \int_0^\infty \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \int_0^\infty \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dE d^3r \right] + \\ & + v(\Sigma_t - \Sigma_{S0}) \end{aligned} \quad (4.15)$$

Na equação (3.20) pode ser reescrita considerando-se o reator homogêneo:

$$I_F = \int_0^\infty \int \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^\infty \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' dE d^3r \quad (4.16)$$

Substitui-se a equação (4.16) na equação (4.15):

$$f_A(t) = \frac{(1-\beta)}{\Lambda_F} \left[\int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \int_0^\infty \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' dEd^3r \right. \\ \left. - \int_V \int_0^\infty \phi^*(\vec{r}, E, t_0) \left\{ \int_0^\infty \chi_p(E) \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \nu(E') f(\vec{r}, E') dE' \right\} dEd^3r \right] + \nu(\Sigma_t - \Sigma_{s0}) \quad (4.17)$$

Note que as integrais entre os colchetes são idênticas e com sinal oposto se anulando, logo:

$$f_A(t) = \nu(\Sigma_t - \Sigma_{s0}) = \nu\Sigma_a \quad (4.18)$$

Os valores típicos para a velocidade dos nêutrons, o coeficiente de difusão e as seções de choque de absorção e transferência para um reator homogêneo podem ser facilmente obtidos na literatura, como verifica-se em DUDERSTADT & HAMILTON [2] , HETRICK [9], ESPINOSA-PAREDES et al [14] e JAHANBIN & MALMIR [26].

As Equações da Cinética Pontual Modificada diferem das Equações da Cinética Pontual Clássica pelos termos acrescidos na equação (3.22) em comparação com a equação (2.14), quais sejam:

$$\frac{1}{f_D} \frac{d^2 n(t)}{dt^2} + \left(\frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta(t))}{\Lambda(t)} \right) \frac{dn(t)}{dt} + \frac{1}{f_D} \sum_{i=1}^N \lambda_i \frac{dC_i(t)}{dt} \quad (4.19)$$

Note que ocorre que todos os termos são multiplicados pelo inverso da freqüência de difusão o que implica um aumento da relevância dos termos em comparação com o restante da equação (3.22) a medida que a freqüência de difusão diminui. Pode ser relevante a razão entre a freqüência de absorção e a freqüência de difusão que aparece no segundo termo. Uma escolha destes parâmetros a partir do que pode ser obtido na literatura é fundamental e deve ser feita com critério.

A estratégia da análise da aproximação da derivada do logaritmo da corrente de nêutrons consiste em obter a solução das Equações da Cinética Pontual Modificada e comparar com a solução das Equações da Cinética Pontual Clássica, mas em uma análise preliminar pode-se verificar que com os valores possíveis para os parâmetros cinéticos os termos da equação (4.19) são relativamente pequenos. Além disso, verifica-se uma grande sensibilidade do seu comportamento em tratando da razão entre a freqüência de absorção e a freqüência de difusão (ou freqüência de transporte de nêutrons).

O primeiro termo, que envolve uma derivada segunda da densidade de nêutrons pode ser analisado como uma taxa de variação temporal da variação temporal da densidade de nêutrons. Com uma analogia rudimentar poderíamos afirmar que este termo está para a

aceleração na cinemática, assim como a taxa de variação da densidade de nêutrons está para a velocidade na cinemática.

O segundo termo acrescenta coeficientes à derivada da densidade de nêutrons que já aparecia nas Equações da Cinética Pontual Clássica. Basta comparar a magnitude dos coeficientes.

O terceiro termo introduz uma taxa de variação na concentração dos precursores, o que parece ser bastante razoável em ser considerada.

5. Soluções para as Equações da Cinética Pontual com um Grupo de Precursores

Com um grupo de precursores as Equações da Cinética Pontual Clássica e Modificada ficam mais simples de serem resolvidas, embora a forma das equações com seis grupos de precursores é melhor em termos práticos porque reproduz com mais fidelidade o comportamento da distribuição de nêutrons em um reator nuclear. No entanto o uso das equações com apenas um grupo de precursores serve para validar a metodologia empregada e realizar testes comparativos entre os modelos Clássico e Modificado.

A partir das equações (2.14), (2.15) e (3.22) pode-se escrever as Equações da Cinética Pontual Clássica e Modificada para um grupo de precursores.

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho(t) - \beta)}{\Lambda} n(t) + \lambda \cdot C(t) \quad (5.1)$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} n(t) - \lambda C(t) \quad (5.2)$$

$$\frac{1}{f_D} \frac{d^2 n(t)}{dt^2} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1 - \beta)}{\Lambda} \right) \frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho(t) - \beta)}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) + \frac{\lambda}{f_D(t)} \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.3)$$

Note que a equação (5.2) é a mesma para a Cinética Pontual Clássica e para a Cinética Pontual Modificada. A equação (5.1) pertence a Cinética Pontual Clássica e a equação (5.3) pertence a Cinética Pontual Modificada.

Obteremos a solução das equações utilizando dois métodos distintos. No primeiro método o cálculo é feito a partir da transformada de Laplace no segundo método usa-se as diferenças finitas.

5.1 Solução das Equações da Cinética Pontual Clássica com um grupo de precursores usando a técnica da Transformada de Laplace

Métodos analíticos adotados para se obter a solução das equações da cinética pontual são descritos em DUDERSTADT & HAMILTON [2], HENRY [3] e STACEY [27]. Neste trabalho será usada a técnica da Transformada de Laplace para se obter uma solução analítica para as equações da cinética pontual. Um estudo completo acerca das Transformadas de Laplace é encontrado em diversas referências, tais como, BUTKOV [28], DYKE [29] e SCHIFF [30].

O uso da Transformada de Laplace na obtenção de soluções para as equações da cinética pontual pode ser visto em SUESCÚN, MARTINEZ & DA SILVA [22]. Somam-se as equações (5.1) e (5.2) apresentadas na seção anterior:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t)}{\Lambda} n(t) - \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.4)$$

A situação particular que será analisada é a inserção de um degrau de reatividade, bastante comum na literatura, onde considera-se $\rho(t) = \rho_0$, ou seja, uma reatividade constante. Isso é feito em DUDERSTADT & HAMILTON [2] e STACEY [27]. Diversos artigos, tais como, KINARD & ALLEN [7], SÁNCHEZ [6] e CHAO & ATTARD [4] também abordam a situação do degrau de reatividade. Assim sendo, reescreve-se as equações (5.1) e (5.4), respectivamente:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) + \lambda \cdot C(t) \quad (5.5)$$

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho_0}{\Lambda} n(t) - \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.6)$$

Deriva-se a equação (5.5) em relação ao tempo:

$$\frac{d^2n(t)}{dt^2} = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \frac{dn(t)}{dt} + \lambda \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.7)$$

Multiplica-se a equação (5.6) por λ :

$$\lambda \frac{dn(t)}{dt} = \frac{\lambda\rho_0}{\Lambda} n(t) - \lambda \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.8)$$

Soma-se as equações (5.7) e (5.8):

$$\frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left(\lambda - \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \frac{dn(t)}{dt} - \frac{\lambda\rho_0}{\Lambda} n(t) = 0 \quad (5.9)$$

Nota-se que a equação (5.9) possui uma única incógnita que é a densidade de nêutrons. A técnica da Transformada de Laplace é adota a partir daqui, lembrando que as transformadas de Laplace das derivadas são definidas:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\left(\frac{df(t)}{dt}\right) &\equiv s \cdot \mathcal{L}(f(t)) - f(0) \\ \mathcal{L}\left(\frac{d^2f(t)}{dt^2}\right) &\equiv s^2 \cdot \mathcal{L}(f(t)) - s \cdot f(0) - \left. \frac{d(f(t))}{dt} \right|_{t=0} \\ \mathcal{L}\left(\frac{d^nf(t)}{dt^n}\right) &\equiv s^n \cdot \mathcal{L}(f(t)) - \sum_{i=1}^n s^{n-i} \cdot \left. \frac{d^{i-1}(f(t))}{dt^{i-1}} \right|_{t=0} \end{aligned}$$

Assim, aplica-se a Transformada de Laplace na equação (5.9):

$$s^2 \mathcal{L}(n(t)) - sn(0) - Dn(0) + \left(\lambda - \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} \right) [s \mathcal{L}(n(t)) - n(0)] - \frac{\lambda\rho_0}{\Lambda} \mathcal{L}(n(t)) = 0 \quad (5.10)$$

Onde define-se:

$$n(0) \equiv n_0 \quad (5.11)$$

$$Dn(0) \equiv \left. \frac{d(n(t))}{dt} \right|_{t=0} \quad (5.12)$$

É razoável considerar que a concentração de precursores não varia no instante inicial, ou seja,

$$\left. \frac{dC(t)}{dt} \right|_{t=0} = 0 \quad (5.13)$$

A partir da equação (5.6) para $t=0$ e considerando as equações (5.11), (5.12) e (5.13), segue que:

$$Dn(0) = \left. \frac{d(n(t))}{dt} \right|_{t=0} = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \quad (5.14)$$

Reescreve-se a equação (5.10):

$$\left\{ s^2 + \left(\lambda - \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} \right) s - \frac{\lambda \rho_0}{\Lambda} \right\} \mathcal{L}(n(t)) = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 + \left(\frac{\lambda \Lambda - \rho_0 + \beta}{\Lambda} \right) n_0 + n_0 s \quad (5.15)$$

Logo:

$$\mathcal{L}(n(t)) = \left(\frac{\lambda \Lambda + \beta + \Lambda s}{(\Lambda s^2 + (\lambda \Lambda - \rho_0 + \beta) s - \lambda \rho_0)} \right) n_0 \quad (5.16)$$

Por simplicidade, define-se:

$$G \equiv \lambda \Lambda + \beta \quad (5.17)$$

A equação (5.16) pode ser reescrita como se segue:

$$\mathcal{L}(n(t)) = \left(\frac{G + \Lambda s}{\Lambda s^2 + (G - \rho_0) s - \lambda \rho_0} \right) n_0 \quad (5.18)$$

Aplicando a transformada de Laplace inversa nos dois lados segue:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left[\left(\frac{G + \Lambda s}{\Lambda s^2 + (G - \rho_0) s - \lambda \rho_0} \right) n_0 \right] \quad (5.19)$$

Para se resolver equação (5.19) usa-se uma decomposição em frações parciais:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{K_1}{s - \mu_1} + \frac{K_2}{s - \mu_2} \right) \quad (5.20)$$

Note que a equação (5.20) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{K_1(s - \mu_2) + K_2(s - \mu_1)}{(s - \mu_1)(s - \mu_2)} \right] = \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{(K_1 + K_2)s - K_1\mu_2 - K_2\mu_1}{s^2 - (\mu_1 + \mu_2)s + \mu_1\mu_2} \right] \quad (5.21)$$

Rearranjando a equação (5.19), segue que:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left[\left(\frac{\frac{G}{\Lambda} + s}{s^2 + \frac{(G - \rho_0)}{\Lambda}s - \frac{\lambda}{\Lambda}\rho_0} \right) n_0 \right] \quad (5.22)$$

Comparando-se as equações (5.21) e (5.22), vem:

$$K_1 + K_2 = 1 \quad (5.23)$$

$$-K_1\mu_2 - K_2\mu_1 = \frac{G}{\Lambda} \quad (5.24)$$

$$-(\mu_1 + \mu_2) = \frac{G - \rho_0}{\Lambda} \quad (5.25)$$

$$\mu_1\mu_2 = -\frac{\lambda}{\Lambda}\rho_0 \quad (5.26)$$

Primeiramente é resolvido o sistema composto pelas equações (5.25) e (5.26), o que resulta na equação do segundo grau:

$$\mu_1^2 + \frac{(G - \rho_0)}{\Lambda}\mu_1 - \frac{\lambda}{\Lambda}\rho_0 = 0 \quad (5.27)$$

Logo:

$$\mu_1 = \frac{-G + \rho_0 \pm \sqrt{G^2 - 2\rho_0G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda} \quad (5.28)$$

E, portanto:

$$\begin{aligned}\mu_2 &= \frac{G - \rho_0 \mp \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda} + \frac{(-G + \rho_0)}{\Lambda} = \\ &= \frac{-G + \rho_0 \mp \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda}\end{aligned}\quad (5.29)$$

Isso implica, obviamente, que:

1° = Se

$$\mu_1 = \frac{-G + \rho_0 + \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda}$$

Logo,

$$\mu_2 = \frac{-G + \rho_0 - \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda}$$

2° = Se

$$\mu_1 = \frac{-G + \rho_0 - \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda}$$

Logo,

$$\mu_2 = \frac{-G + \rho_0 + \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda}$$

Isso significa que qualquer uma das definições acima são válidas, logo, a escolha é feita de modo arbitrário:

$$\mu_1 = \frac{-G + \rho_0 + \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda}\quad (5.30)$$

e

$$\mu_2 = \frac{-G + \rho_0 - \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda}\quad (5.31)$$

Substituindo a equação (5.23) na equação (5.24), vem:

$$K_1(\mu_1 - \mu_2) = \frac{G}{\Lambda} + \mu_1 \quad (5.32)$$

Isolando-se o K_1 na equação (5.32):

$$K_1 = \frac{G + \mu_1 \Lambda}{\Lambda(\mu_1 - \mu_2)} \quad (5.33)$$

Substitui-se as equações (5.30) e (5.31) na equação (5.33):

$$K_1 = \frac{G + \rho_0 + \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}} \quad (5.34)$$

Substitui-se a equação (5.34) na equação (5.23), isolando-se o K_2 :

$$K_2 = \frac{-G - \rho_0 + \sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\sqrt{G^2 - 2\rho_0 G + \rho_0^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}} \quad (5.35)$$

Substitui-se a definição do G , ou seja, a equação (5.17), nas equações (5.30), (5.31), (5.34) e (5.35), obtendo-se: $\lambda\Lambda + \beta$

$$\mu_1 = \frac{-(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0) + \sqrt{(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda} \quad (5.36)$$

$$\mu_2 = \frac{-(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0) - \sqrt{(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\Lambda} \quad (5.37)$$

$$K_1 = \frac{(\lambda\Lambda + \beta + \rho_0) + \sqrt{(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}} \quad (5.38)$$

$$K_2 = \frac{-(\lambda\Lambda + \beta + \rho_0) + \sqrt{(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}}{2\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta - \rho_0)^2 + 4\lambda\Lambda\rho_0}} \quad (5.39)$$

A solução da equação diferencial (5.9), obtida a partir da transformada inversa expressa pela equação (5.20), cujos coeficientes foram definidos nas equações (5.36), (5.37), (5.38) e (5.39), é:

$$n(t) = K_1 \exp(\mu_1 t) + K_2 \exp(\mu_2 t) \quad (5.40)$$

Note que a concentração dos precursores pode ser obtida diretamente pela equação (6.5) que é reescrita:

$$C(t) = \frac{1}{\lambda} \frac{dn(t)}{dt} - \frac{(\rho_0 - \beta)}{\lambda \Lambda} n(t) \quad (5.41)$$

Substituindo a equação (5.40) na equação (5.41), vem:

$$C(t) = \frac{1}{\lambda} (\mu_1 K_1 \exp(\mu_1 t) + \mu_2 K_2 \exp(\mu_2 t)) - \frac{(\rho_0 - \beta)}{\lambda \Lambda} (K_1 \exp(\mu_1 t) + K_2 \exp(\mu_2 t)) \quad (5.42)$$

Simplificando a equação (5.42), obtém-se:

$$C(t) = \frac{1}{\lambda} \left(\mu_1 - \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) K_1 \exp(\mu_1 t) + \frac{1}{\lambda} \left(\mu_2 - \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) K_2 \exp(\mu_2 t) \quad (5.43)$$

As equações (5.40) e (5.43) satisfazem as equações (5.2) e (5.5). Basta substituir as equações (5.36), (5.37), (5.38) e (5.39) nas equações (5.40) e (5.43).

5.2 Solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com um grupo de precursores usando a técnica da Transformada de Laplace

As equações da cinética pontual sem a aproximação referente a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons para um grupo de precursores são as equações (5.2) e (5.3), que são reescritas para o caso de um degrau de reatividade, citado na seção anterior:

$$\frac{1}{f_D} \cdot \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda}\right) \frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) + \lambda \cdot C(t) + \frac{\lambda}{f_D} \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.44)$$

$$\frac{dC(t)}{dt} = -\lambda \cdot C(t) + \frac{\beta}{\Lambda} \cdot n(t) \quad (5.45)$$

Soma-se a equação (5.44) com a equação (5.45):

$$\frac{1}{f_D} \cdot \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda}\right) \frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho_0}{\Lambda} n(t) + \left(\frac{\lambda}{f_D} - 1\right) \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.46)$$

Também é possível substituir $\frac{dC(t)}{dt}$ definido pela equação (5.45) na equação (5.44):

$$\frac{1}{f_D} \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda}\right) \frac{dn(t)}{dt} = \left\{ \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} + \frac{\lambda\beta}{\Lambda f_D} \right\} n(t) + \left(\lambda - \frac{\lambda^2}{f_D} \right) C(t) \quad (5.47)$$

Deriva-se a equação (5.47) com relação ao tempo, obtendo-se:

$$\frac{1}{f_D} \frac{d^3n(t)}{dt^3} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{(1-\beta)}{\Lambda f_D}\right) \frac{d^2n(t)}{dt^2} = \left\{ \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} + \frac{\lambda\beta}{\Lambda f_D} \right\} \frac{dn(t)}{dt} + \left(\lambda - \frac{\lambda^2}{f_D} \right) \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.48)$$

Multiplica-se a equação (5.46) por λ :

$$\frac{\lambda}{f_D} \frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left(\lambda + \lambda \frac{f_A}{f_D} - \frac{\lambda}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \frac{dn(t)}{dt} = \frac{\lambda\rho_0}{\Lambda} n(t) + \left(\frac{\lambda^2}{f_D} - \lambda \right) \frac{dC(t)}{dt} \quad (5.49)$$

Soma-se a equação (5.48) com a equação (5.49):

$$\frac{d^3n(t)}{dt^3} + \left\{ f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} - \lambda \right\} \frac{d^2n(t)}{dt^2} - \left\{ \frac{f_D(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} + \frac{2\lambda\beta}{\Lambda} + \lambda \left(f_D + f_A - \frac{1}{\Lambda} \right) \right\} \frac{dn(t)}{dt} - \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda} n(t) = 0 \quad (5.50)$$

Note que a equação (5.50) é uma equação diferencial linear de terceira ordem homogênea e será resolvida pela técnica de transformada de Laplace. Aplicando a transformada de Laplace na equação (5.50), segue que:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{f_D} \cdot \left\{ s^3 \cdot \mathcal{L}(n(t)) - s^2 \cdot n(0) - s \cdot D(n(0)) - D^2(n(0)) \right\} + \\
& + \left\{ 1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{(1-\beta)}{\Lambda \cdot f_D} - \frac{\lambda}{f_D} \right\} \left\{ s^2 \cdot \mathcal{L}(n(t)) - s \cdot n(0) - D(n(0)) \right\} = \\
& = \left\{ \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} + \frac{2\lambda\beta}{\Lambda f_D} + \lambda + \lambda \frac{f_A}{f_D} - \frac{\lambda}{f_D \Lambda} \right\} \left\{ s \cdot \mathcal{L}(n(t)) - n(0) \right\} + \frac{\lambda \rho_0}{\Lambda} \mathcal{L}(n(t))
\end{aligned} \tag{5.51}$$

Redefinindo-se as constantes, pode-se simplificar a equação (5.51):

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{f_D} \left\{ s^3 \mathcal{L}(n(t)) - s^2 n(0) - s D(n(0)) - D^2(n(0)) \right\} + A \left\{ s^2 \mathcal{L}(n(t)) - s n(0) - D(n(0)) \right\} = \\
& = B \left\{ s \mathcal{L}(n(t)) - n(0) \right\} + \frac{\lambda \rho_0}{\Lambda} \mathcal{L}(n(t))
\end{aligned} \tag{5.52}$$

Onde:

$$\begin{aligned}
A & \equiv \left\{ 1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{(1-\beta)}{\Lambda \cdot f_D} - \frac{\lambda}{f_D} \right\} \\
B & \equiv \left\{ \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} + \frac{2\lambda\beta}{\Lambda f_D} + \lambda + \lambda \frac{f_A}{f_D} - \frac{\lambda}{f_D \Lambda} \right\}
\end{aligned}$$

Na equação (5.52) isola-se a transformada de Laplace da densidade de nêutrons:

$$\mathcal{L}(n(t)) = \frac{\left\{ \left(\frac{1}{f_D} n(0) \right) s^2 + \left(\frac{1}{f_D} D(n(0)) + A \cdot n(0) \right) s + \left(\frac{1}{f_D} D^2(n(0)) + A \cdot D(n(0)) + B \cdot n(0) \right) \right\}}{\frac{1}{f_D} s^3 + A \cdot s^2 + B \cdot s + \frac{\lambda \rho_0}{\Lambda}}$$

Aplicando a transformada de Laplace inversa nos dois lados segue:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{\left\{ \left(\frac{1}{f_D} n(0) \right) s^2 + \left(\frac{1}{f_D} D(n(0)) + A n(0) \right) s + \left(\frac{1}{f_D} D^2(n(0)) + A D(n(0)) + B n(0) \right) \right\}}{\frac{1}{f_D} s^3 + A s^2 + B s + \frac{\lambda \rho_0}{\Lambda}} \right) \tag{5.53}$$

Para resolver a transformada de Laplace inversa deve-se fatorar a razão de polinômios de modo a obter:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{K_1}{s - \mu_1} + \frac{K_2}{s - \mu_2} + \frac{K_3}{s - \mu_3} \right) \quad (5.54)$$

Note que a equação (5.54) corresponde exatamente a equação (6.53), ou seja, pode-se reescrever (5.54) da seguinte forma:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{(K_1 + K_2 + K_3)s^2 - (K_1(\mu_2 + \mu_3) + K_2(\mu_1 + \mu_3) + K_3(\mu_1 + \mu_2))s + \mu_2\mu_3K_1 + \mu_1\mu_3K_2 + \mu_1\mu_2K_3}{s^3 - (\mu_1 + \mu_2 + \mu_3)s^2 + (\mu_1\mu_2 + \mu_2\mu_3 + \mu_1\mu_3)s - \mu_1\mu_2\mu_3} \right)$$

Multiplicando o numerador e o denominador da equação (5.53) por f_D segue:

$$n(t) = \mathcal{L}^{-1} \left(\frac{n(0)s^2 + (D(n(0)) + f_D A \cdot n(0))s + (D^2(n(0)) + f_D A \cdot D(n(0)) + f_D B \cdot n(0))}{s^3 + f_D A \cdot s^2 + f_D B \cdot s + \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda}} \right) \quad (5.55)$$

Comparando as equações acima é possível deduzir:

$$\begin{aligned} n(0) &= K_1 + K_2 + K_3 \\ D(n(0)) + f_D A \cdot n(0) &= -(K_1(\mu_2 + \mu_3) + K_2(\mu_1 + \mu_3) + K_3(\mu_1 + \mu_2)) \\ D^2(n(0)) + f_D A \cdot D(n(0)) + f_D B \cdot n(0) &= \mu_2\mu_3K_1 + \mu_1\mu_3K_2 + \mu_1\mu_2K_3 \\ f_D A &= -(\mu_1 + \mu_2 + \mu_3) \\ f_D B &= \mu_1\mu_2 + \mu_2\mu_3 + \mu_1\mu_3 \\ \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda} &= -\mu_1\mu_2\mu_3 \end{aligned} \quad (5.56)$$

As equações (5.56) formam um sistema algébrico:

$$\begin{aligned} K_1 &= n(0) - \frac{(D(n(0)) + f_D A n(0) + n(0)(\mu_2 + \mu_3))}{(\mu_2 - \mu_1)} + \\ &+ \frac{[n(0)(\mu_3)^2 + (D(n(0)) + f_D A n(0))\mu_3 + D^2(n(0)) + f_D A D(n(0)) + f_D B n(0)](\mu_3 - \mu_2)}{\mu_1(\mu_2)^2 - \mu_1(\mu_3)^2 + \mu_2(\mu_3)^2 - \mu_2(\mu_1)^2 + \mu_3(\mu_1)^2 - \mu_3(\mu_2)^2} \end{aligned} \quad (5.57)$$

$$\begin{aligned} K_2 &= \frac{(D(n(0)) + f_D A n(0) + n(0)(\mu_2 + \mu_3))}{(\mu_2 - \mu_1)} + \\ &+ \frac{[n(0)(\mu_3)^2 + (D(n(0)) + f_D A n(0))\mu_3 + D^2(n(0)) + f_D A D(n(0)) + f_D B n(0)](\mu_1 - \mu_3)}{\mu_1(\mu_2)^2 - \mu_1(\mu_3)^2 + \mu_2(\mu_3)^2 - \mu_2(\mu_1)^2 + \mu_3(\mu_1)^2 - \mu_3(\mu_2)^2} \end{aligned} \quad (5.58)$$

$$K_3 = \frac{\left[n(0)(\mu_3)^2 + (D(n(0)) + f_D A n(0))\mu_3 + D^2(n(0)) + f_D A D(n(0)) + f_D B n(0) \right] (\mu_2 - \mu_1)}{\mu_1(\mu_2)^2 - \mu_1(\mu_3)^2 + \mu_2(\mu_3)^2 - \mu_2(\mu_1)^2 + \mu_3(\mu_1)^2 - \mu_3(\mu_2)^2} \quad (5.59)$$

$$\mu_1 = -f_D A - \mu_2 - \mu_3 \quad (5.60)$$

$$\mu_3(\mu_2)^2 + (f_D A \cdot \mu_3 + (\mu_3)^2)\mu_2 - \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda} = 0 \quad (5.61)$$

$$(\mu_3)^3 + f_D A \cdot (\mu_3)^2 + \left(\frac{2f_D B + (f_D A)^2 - f_D A}{2} \right) \mu_3 + \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda} = 0 \quad (5.62)$$

A equação (5.62) pode ser resolvida diretamente para obter o valor de μ_3 . Note que ela é uma equação do terceiro grau. Para resolvê-la, inicialmente substitui-se a variável μ_3 por

$$x - \frac{f_D \cdot A}{3}:$$

$$\left(x - \frac{f_D \cdot A}{3} \right)^3 + f_D A \cdot \left(x - \frac{f_D \cdot A}{3} \right)^2 + \left(\frac{2f_D B + (f_D A)^2 - f_D A}{2} \right) \left(x - \frac{f_D \cdot A}{3} \right) + \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda} = 0$$

$$x^3 - f_D \cdot A(x)^2 + 3 \cdot \left(\frac{f_D \cdot A}{3} \right)^2 x - \left(\frac{f_D \cdot A}{3} \right)^3 + f_D \cdot A(x)^2 - \frac{2}{3}(f_D \cdot A)^2 x + \left(\frac{f_D \cdot A}{3} \right)^2 + f_D B \cdot x + \frac{(f_D A)^2}{2} \cdot x - \frac{f_D A}{2} \cdot x - \frac{(f_D)^2 \cdot A \cdot B}{3} - \frac{(f_D A)^3}{6} + \frac{(f_D A)^2}{6} + \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda} = 0$$

$$x^3 + \left(\frac{1}{6}(f_D \cdot A)^2 + f_D B - \frac{f_D A}{2} \right) x - \frac{(f_D)^2 \cdot A \cdot B}{3} - \frac{11}{54} \cdot (f_D A)^3 + \frac{5}{18} \cdot (f_D A)^2 + \frac{f_D \lambda \rho_0}{\Lambda} = 0 \quad (5.63)$$

Note que na equação (5.63) o termo correspondente ao x^2 foi eliminado. Assim, ela pode ser reescrita:

$$x^3 + p \cdot x + q = 0 \quad (5.64)$$

A equação (5.64) foi resolvida por Cardano e Tartaglia, de acordo com GARBI [31] e a solução é a conhecida fórmula de Cardano-Tattaglia:

$$x = x_1 = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\left(\frac{q}{2}\right)^2 + \left(\frac{p}{3}\right)^3}} \quad (5.65)$$

Note que a equação (5.65) corresponde apenas a uma das três soluções da equação (5.64). As outras duas soluções podem ser obtidas dividindo-se a equação (5.64) por $(x-x_1)$ o que nos permite obter:

$$\frac{x^3 + p \cdot x + q}{x - x_1} = ax^2 + b \cdot x + c$$

Logo,

$$x^3 + p \cdot x + q = (ax^2 + b \cdot x + c)(x - x_1) = 0$$

O que nos permite afirmar que:

$$ax^2 + bx + c = 0 \tag{5.66}$$

As raízes da equação (5.66) serão as duas outras soluções da equação (5.64). Dessa forma são obtidas três soluções possíveis para μ_3 e que satisfazem a equação (5.62). As soluções são substituídas na equação (5.61). A equação (5.61) torna-se uma equação do 2º grau com variável μ_2 e que pode ser resolvida trivialmente. Com as soluções de μ_2 e μ_3 pode-se obter μ_1 a partir da equação (5.60). As equações (5.57), (5.58) e (5.59) são todas expressas apenas em termos de μ_1 , μ_2 e μ_3 e assim os valores de K_1 , K_2 e K_3 são diretamente determinados.

Note que os valores de K_1 , K_2 e K_3 dependem de $D^2(n(0))$, $D(n(0))$ e $n(0)$ que são as condições iniciais adotadas. Para $D(n(0))$ e $n(0)$, usa-se as equações (5.11) e (5.14). Para obter o valor de $D^2(n(0))$ primeiramente obtém-se $C(0)$ a partir das equações (5.11) e (5.13) que são substituídas na equação (5.2):

$$C(0) = \frac{\beta}{\lambda \Lambda} n_0 \tag{5.67}$$

Substitui-se as equações (5.11), (5.13), (5.14) e (5.67) na equação (5.44) para $t=0$, vem:

$$\left. \frac{d^2 n(t)}{dt^2} \right|_{t=0} = D^2(n(0)) = \left(-f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \quad (5.68)$$

A partir da resolução da transformada de Laplace inversa da equação (5.54), segue que:

$$n(t) = K_1 \cdot \exp(\mu_1 t) + K_2 \exp(\mu_2 t) + K_3 \exp(\mu_3 t) \quad (5.69)$$

5.3 Solução das Equações da Cinética Pontual Clássica com um grupo de precursores usando o Método de Diferenças Finitas

É um método numérico bastante utilizado na Engenharia em geral e mais especificamente na área de Física de Reatores. Um estudo bastante completo sobre o assunto encontra-se em ALVIM [32], LE VEQUE [33], BOOLE [34] e JORDAN [35].

Segundo BOOLE [34], o cálculo das diferenças finitas pode ser estritamente definido como a ciência que se ocupa com as proporções de incrementos simultâneos de quantidades mutuamente dependentes. Torna-se evidente que as diferenças finitas vão ter importantes aplicações no Cálculo Diferencial que se ocupa dos limites em que tais índices se aproximam a medida que os incrementos que são indefinidamente diminuídos.

A definição de derivada é apresentada:

$$\frac{df(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \quad (5.70)$$

Quando Δt é bem próximo de zero a seguinte aproximação é válida:

$$\frac{df(t)}{dt} \cong \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \quad (5.71)$$

Note que quanto menor for o Δt melhor será o desempenho do método de diferenças finitas até um valor limite onde não ocorrerá mais melhora alguma, mas por outro lado, aumentamos o tempo computacional e o erro de arredondamento, o que torna inviável a obtenção de um resultado exato, no sentido mais restrito do termo.

Aplicando a aproximação de diferenças finitas para as equações da cinética pontual para um grupo de precursores considerando ainda o caso da inserção de um degrau de reatividade, quais sejam as equações (5.5) e (5.2), respectivamente, vem:

$$\frac{n(t+\Delta t)-n(t)}{\Delta t} = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) \quad (5.72)$$

$$\frac{C(t+\Delta t)-C(t)}{\Delta t} = \frac{\beta}{\Lambda} n(t) - \lambda C(t) \quad (5.73)$$

Consideram-se as definições:

$$\begin{aligned} n_k &\equiv n(t_k) \\ n_{k+1} &\equiv n(t_{k+1}) \\ C_k &\equiv C(t_k) \\ C_{k+1} &\equiv C(t_{k+1}) \\ t_{k+1} &\equiv t_k + \Delta t \end{aligned} \quad (5.74)$$

Explicita-se n_{k+1} e C_{k+1} nas (5.72) e (5.73), obtendo-se:

$$n_{k+1} = n_k + \Delta t \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n_k + \Delta t \lambda C_k \quad (5.75)$$

$$C_{k+1} = C_k + \Delta t \frac{\beta}{\Lambda} n_k - \Delta t \lambda C_k \quad (5.76)$$

Nota-se que as equações (5.75) e (5.76) continuam acopladas e devem ser resolvidas no mesmo passo. Observe o exemplo a seguir.

Dados os valores de n_0 e C_0 , calcula-se no primeiro passo n_1 e C_1 :

$$n_1 = n_0 + \Delta t \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n_0 + \Delta t \lambda C_0 \quad (5.77)$$

$$C_1 = C_0 + \Delta t \frac{\beta}{\Lambda} n_0 - \Delta t \lambda C_0 \quad (5.78)$$

Para se calcular n_2 ou C_2 , no segundo passo, deve-se já ter feito antes o cálculo de n_1 e C_1 , visto que:

$$n_2 = n_1 + \Delta t \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n_1 + \Delta t \sum_{i=1}^6 \lambda C_1 \quad (5.79)$$

$$C_2 = C_1 + \Delta t \frac{\beta}{\Lambda} n_1 - \Delta t \lambda C_1 \quad (5.80)$$

Nota-se que a técnica de diferenças finitas é aplicada ao sistema de equações diferenciais acopladas (5.5) e (5.2) sem que seja necessário desacoplar as equações, desde que os valores de n_k e C_k , sejam calculados no mesmo passo.

As condições iniciais n_0 e C_0 são determinadas pelas equações (5.11) e (5.67). A escolha do intervalo de tempo para o passo, ou seja, a escolha de Δt deve ser criteriosa. Começando com um passo grande em relação a escala de tempo do problema ao diminuir este passo o resultado vai melhorando, mas chega-se num valor em que o resultado praticamente se estabiliza, enquanto o esforço computacional aumenta consideravelmente. Assim, alguns testes preliminares tiveram que ser feitos para que fosse possível encontrar o valor ótimo para o passo, que foi de 10^{-5} s para as situações mais severas, ou seja, com reatividade igual a 0,007 e 10^{-6} s para as demais. Vale ressaltar que nem todos os passos tiveram os seus dados impressos, o que foi feito a cada mil ou 10 mil passos.

Outro cuidado que se deve ter na execução da técnica de diferenças finitas é o problema da rigidez do sistema. Segundo CHAO & ATTARD [4] e NUNES [5], a rigidez ocorre devido a grande diferença no tempo que leva para surgir os nêutrons retardados em comparação com os nêutrons prontos. Esse é um problema inerente a sistemas de equações que possuem grande diferença na constante de tempo, tal como as equações da cinética pontual, tanto faz que sejam as clássicas ou as modificadas.

Torna-se importante realizar os cálculos por meio de métodos diferentes e valores diferentes a fim de que seja possível detectar eventuais discrepâncias nos resultados. Assim, o uso da técnica da Transformada de Laplace e das Diferenças Finitas tem a sua relevância para que a comparação dos resultados tenha um razoável grau de confiabilidade.

5.4 Solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com um grupo de precursores usando o Método de Diferenças Finitas

Para discretizar as equações da cinética pontual modificada, torna-se conveniente ampliar a definição de derivada para uma ordem n-ésima. Logo,

$$\frac{d^n f(t)}{dt^n} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\Delta t^{-n} \sum_{j=0}^n (-1)^{n-j} \binom{n}{j} f(t + j\Delta t) \right] \quad (5.81)$$

Para a derivada segunda, vem:

$$\frac{d^2 f(t)}{dt^2} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \left[\Delta t^{-2} (f(t + 2\Delta t) - 2f(t + \Delta t) + f(t)) \right] \quad (5.82)$$

Aplica-se a técnica de Diferenças Finitas na equação (6.44):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{f_D} \left\{ \frac{n(t + 2\Delta t) - 2n(t + \Delta t) + n(t)}{\Delta t^2} \right\} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \left\{ \frac{n(t + \Delta t) - n(t)}{\Delta t} \right\} = \\ & = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) + \frac{\lambda}{f_D} \left\{ \frac{C(t + \Delta t) - C(t)}{\Delta t} \right\} \end{aligned} \quad (5.83)$$

A equação (5.83) é reescrita:

$$\begin{aligned} n(t + 2\Delta t) &= \left[-1 + \left(f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t + \left(f_D \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \Delta t^2 \right] n(t) + \\ &+ \left[2 + \left(-f_D - f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t \right] n(t + \Delta t) + [f_D \lambda \Delta t^2 - \lambda \Delta t] C(t) + \\ &+ [\lambda \Delta t] C(t + \Delta t) \end{aligned} \quad (5.84)$$

Usando-se as definições (5.74), segue que:

$$\begin{aligned}
 n_{k+2} = & \left[-1 + \left(f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t + \left(f_D \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \Delta t^2 \right] n_k + [\lambda \Delta t] C_{k+1} \\
 & + \left[2 + \left(-f_D - f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t \right] n_{k+1} + [f_D \lambda \Delta t^2 - \lambda \Delta t] C_k
 \end{aligned} \tag{5.85}$$

As equações (5.85) e (5.76) são resolvidas por meio de um processo direto onde precisa-se conhecer inicialmente os valores de n_0 , C_0 , n_1 e C_1 . As condições iniciais n_0 e C_0 são determinadas pelas equações (5.11) e (5.67), como foi feito na seção anterior. Para obter n_1 e C_1 , considera-se as equações (5.13) e (5.14) com a aproximação de diferenças finitas e o uso das definições (5.74):

$$\frac{C_1 - C_0}{\Delta t} = 0 \tag{5.86}$$

$$\frac{n_1 - n_0}{\Delta t} = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \tag{5.87}$$

O que implica:

$$C_1 = C_0 = \frac{\beta}{\lambda \Lambda} n_0 \tag{5.88}$$

$$n_1 = \left(\frac{\rho_0}{\Lambda} \Delta t + 1 \right) n_0 \tag{5.89}$$

Assim como na seção anterior, será feito um breve exemplo para ilustrar o passo inicial considerando-se as equações (5.85), (5.76), (5.88) e (5.89):

Dados os valores de n_0 , C_0 , n_1 e C_1 calcula-se no primeiro passo n_2 e C_2 :

$$\begin{aligned}
 n_2 = & \left[-1 + \left(f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t + \left(f_D \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \Delta t^2 \right] n_0 + [\lambda \Delta t] \frac{\beta}{\lambda \Lambda} n_0 \\
 & + \left[2 + \left(-f_D - f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t \right] \left(\frac{\rho_0}{\Lambda} \Delta t + 1 \right) n_0 + [f_D \lambda \Delta t^2 - \lambda \Delta t] \frac{\beta}{\lambda \Lambda} n_0
 \end{aligned} \tag{5.90}$$

$$C_2 = C_1 + \Delta t \frac{\beta}{\Lambda} n_1 - \Delta t \lambda C_1 = \frac{\beta}{\Lambda} \left\{ \frac{1}{\lambda} + \frac{\rho_0}{\Lambda} \Delta t^2 \right\} n_0 \quad (5.91)$$

A equação (5.90) é simplificada:

$$n_2 = \left\{ 1 + \left(-f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \frac{\rho_0}{\Lambda} \Delta t^2 \right\} n_0 \quad (5.92)$$

Bem como no caso anterior, alguns testes preliminares tiveram que ser feitos para que fosse possível encontrar o valor ótimo para o passo, que foi de 10^{-5} s para as situações mais severas, ou seja, com reatividade igual a 0,007 e 10^{-6} s para as demais. Vale ressaltar que nem todos os passos tiveram seus dados impressos, o que foi feito a cada mil ou 10 mil passos.

6 Soluções para as Equações da Cinética Pontual com seis Grupos de Precursores

As equações da cinética pontual clássica possuem um número N de precursores, em sua concepção inicial. Segundo relevantes trabalhos sobre o tema, tais como, BRADY et. al. [36] e MILOSEVIC et al [37], a melhor redistribuição dos parâmetros cinéticos dos nêutrons retardados é em seis grupos de precursores. Desta forma, o efeito dos diversos nêutrons retardados que surgem a partir do decaimento dos produtos de fissão pode ser adequadamente considerado, pois será enquadrado em um dos seis grupos.

O decaimento radioativo dos fragmentos de fissão implica no surgimento dos chamados nêutrons retardados após um intervalo de tempo muito grande em comparação com os nêutrons prontos (aqueles que são emitidos logo após a fissão nuclear). O cálculo da Cinética Pontual não pode desprezar os efeitos provocados pelos nêutrons retardados devido sua grande relevância. Segundo DUDERSTADT & HAMILTON [2], apesar dos nêutrons retardados não chegarem a 1% do total de nêutrons no núcleo de um reator nuclear, esta pequena fração de nêutrons é de vital importância para um controle efetivo da reação em cadeia, principalmente quando se trata de eventos transientes rápidos onde se aplicam as Equações da Cinética Pontual de um modo geral.

Na tabela (6.1) abaixo é feita a associação dos precursores com as constantes de decaimento radioativo, λ_i e o percentual de nêutrons retardados para cada grupo de precursores β_i lembrando que os valores apresentados são apenas valores típicos para o U^{235} , conforme foi apresentado em HETRICK [24]. De fato, na situação real, os nêutrons retardados precursores possuem vários valores de constante de decaimento, mas adota-se apenas os seis grupos citados por representar de forma bastante precisa a situação real e de modo bem mais simples. São grupos, como é possível observar na tabela (6.1), com tempos de meia vida nas

faixas de 54 s, 22 s, 6 s, 2 s, 0,5 s e 0,2 s. Cada grupo de precursores, segundo DUDERSTADT & HAMILTON [2], pode conter um número diferente de isótopos. Por exemplo, o grupo com tempo de meia vida de 55 s se deve quase que inteiramente a um único precursor, o Br⁸⁷. Há pelo menos mais dois isótopos, Br⁸⁸ e I¹³⁷ que contribuem mais fortemente para o grupo com tempo de meia vida de 22 s.

Tabela 6.1: Parâmetros dos Grupos Precursores para o U²³⁵

C _i (t)	T _{1/2} (s)	λ _i (s ⁻¹)	β _i
C ₁ (t)	54,51	0,0127	0,000266
C ₂ (t)	21,84	0,0317	0,001491
C ₃ (t)	6,00	0,115	0,001316
C ₄ (t)	2,23	0,311	0,002849
C ₅ (t)	0,496	1,40	0,000896
C ₆ (t)	0,179	3,87	0,000182

A partir das equações (2.14), (2.15) e (3.22) pode-se escrever as Equações da Cinética Pontual Clássica e Modificada para seis grupos de precursores.

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho(t) - \beta)}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (6.1)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t) \text{ , onde } i=1, 2, \dots, 6 \quad (6.2)$$

$$\frac{1}{f_D} \frac{d^2 n(t)}{dt^2} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \frac{dn(t)}{dt} = \frac{(\rho(t) - \beta)}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i}{f_D} \frac{dC_i(t)}{dt} \quad (6.3)$$

Para resolver as Equações da Cinética Pontual Clássica, que tratam-se do sistema de sete equações (6.1) e (6.2) foi adotada a técnica de diferenças finitas. Em relação as Equações da Cinética Pontual Modificada, o sistema formado pelas equações (6.2) e (6.3), também foi adotada a mesma técnica.

Nota-se que ambos os sistemas possuem sete equações diferenciais lineares de primeira ordem acopladas. Isso implica um esforço maior na execução dos cálculos.

Diversos trabalhos versam sobre a solução das Equações da Cinética Pontual com seis grupos de precursores, tais como KINARD & ALLEN [7], SÁNCHEZ [6] e CHAO & ATTARD [4]. Assim, será possível avaliar de modo comparativo os resultados obtidos neste trabalho.

6.1 Solução das Equações da Cinética Pontual Clássica com seis grupos de precursores usando o Método de Diferenças Finitas

As equações (6.1) e (6.2) são resolvidas através do método de diferenças finitas. Aplicando a aproximação de diferenças finitas, qual seja a equação (6.72) para a definição de derivada, para as equações da cinética pontual para seis grupos de precursores vem:

$$\frac{n(t + \Delta t) - n(t)}{\Delta t} = \frac{(\rho(t) - \beta)}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (6.4)$$

$$\frac{C_i(t + \Delta t) - C_i(t)}{\Delta t} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad (6.5)$$

Considera-se $i = 1, 2, 3, \dots, 6$.

Para simplificar os cálculos, levando-se em conta a relevância da aplicação, será considerado o caso da inserção de um degrau de reatividade. Assim sendo, a equação (6.4) é refeita:

$$\frac{n(t + \Delta t) - n(t)}{\Delta t} = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \quad (6.6)$$

Onde ρ_0 é constante.

Nas equações (6.5) e (6.6) isola-se os termos $C_i(t + \Delta t)$ e $n(t + \Delta t)$, respectivamente:

$$C_i(t + \Delta t) = C_i(t) + \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) \Delta t - \lambda_i C_i(t) \Delta t \quad (6.7)$$

Onde considera-se $i = 1, 2, 3, \dots, 6$, e ainda

$$n(t + \Delta t) = n(t) + \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) \Delta t + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) \Delta t \quad (6.8)$$

Consideram-se as definições:

$$\begin{aligned} n_j &\equiv n(t_j) \\ n_{j+1} &\equiv n(t_{j+1}) \\ C_{i,j} &\equiv C_i(t_j) \\ C_{i,j+1} &\equiv C_i(t_{j+1}) \\ t_{j+1} &\equiv t_j + \Delta t \end{aligned} \quad (6.9)$$

Desta forma, as equações (6.7) e (6.8) são discretizadas como se segue:

$$n_{j+1} = \left(1 + \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \Delta t \right) n_j + \Delta t \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_{i,j} \quad (6.10)$$

$$C_{i,j+1} = (1 - \lambda_i \Delta t) C_{i,j} + \frac{\beta_i}{\Lambda} n_j \Delta t \quad (6.11)$$

Onde considera-se $i = 1, 2, 3, \dots, 6$.

Nota-se que as equações (6.10) e (6.11) continuam acopladas e devem ser resolvidas no mesmo passo. Observe o exemplo a seguir.

Dados os valores de $n_0, C_{1,0}, C_{2,0}, C_{3,0}, C_{4,0}, C_{5,0}$ e $C_{6,0}$, calcula-se no primeiro passo $n_1, C_{1,1}, C_{2,1}, C_{3,1}, C_{4,1}, C_{5,1}$ e $C_{6,1}$. Para tanto, é preciso calcular a densidade de nêutrons e a concentração dos precursores no mesmo passo.

$$n_1 = \left(1 + \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \Delta t \right) n_0 + \Delta t \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_{i,0} \quad (6.12)$$

$$C_{1,1} = (1 - \lambda_1 \Delta t) C_{1,0} + \frac{\beta_1}{\Lambda} n_0 \Delta t \quad (6.13)$$

$$C_{2,1} = (1 - \lambda_2 \Delta t) C_{2,0} + \frac{\beta_2}{\Lambda} n_0 \Delta t \quad (6.14)$$

$$C_{3,1} = (1 - \lambda_3 \Delta t) C_{3,0} + \frac{\beta_3}{\Lambda} n_0 \Delta t \quad (6.15)$$

$$C_{4,1} = (1 - \lambda_4 \Delta t) C_{4,0} + \frac{\beta_4}{\Lambda} n_0 \Delta t \quad (6.16)$$

$$C_{5,1} = (1 - \lambda_5 \Delta t) C_{5,0} + \frac{\beta_5}{\Lambda} n_0 \Delta t \quad (6.17)$$

$$C_{6,1} = (1 - \lambda_6 \Delta t) C_{6,0} + \frac{\beta_6}{\Lambda} n_0 \Delta t \quad (6.18)$$

Para se calcular n_2 , $C_{1,2}$, $C_{2,2}$, $C_{3,2}$, $C_{4,2}$, $C_{5,2}$ ou $C_{6,2}$, no segundo passo, deve-se já ter feito antes o cálculo de n_1 , $C_{1,1}$, $C_{2,1}$, $C_{3,1}$, $C_{4,1}$, $C_{5,1}$ e $C_{6,1}$, visto que:

$$n_2 = \left(1 + \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \Delta t \right) n_1 + \Delta t \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_{i,1} \quad (6.19)$$

$$C_{1,2} = (1 - \lambda_1 \Delta t) C_{1,1} + \frac{\beta_1}{\Lambda} n_1 \Delta t \quad (6.20)$$

$$C_{2,2} = (1 - \lambda_2 \Delta t) C_{2,1} + \frac{\beta_2}{\Lambda} n_1 \Delta t \quad (6.21)$$

$$C_{3,2} = (1 - \lambda_3 \Delta t) C_{3,1} + \frac{\beta_3}{\Lambda} n_1 \Delta t \quad (6.22)$$

$$C_{4,2} = (1 - \lambda_4 \Delta t) C_{4,1} + \frac{\beta_4}{\Lambda} n_1 \Delta t \quad (6.23)$$

$$C_{5,2} = (1 - \lambda_5 \Delta t) C_{5,1} + \frac{\beta_5}{\Lambda} n_1 \Delta t \quad (6.24)$$

$$C_{6,2} = (1 - \lambda_6 \Delta t) C_{6,1} + \frac{\beta_6}{\Lambda} n_1 \Delta t \quad (6.25)$$

Nota-se que a técnica de diferenças finitas é aplicada ao sistema de equações diferenciais acopladas que constituem a Cinética Pontual Clássica sem que haja a necessidade de desacoplar as equações, desde que os seus respectivos valores sejam calculados no mesmo passo.

Pode-se determinar as condições iniciais n_0 , $C_{1,0}$, $C_{2,0}$, $C_{3,0}$, $C_{4,0}$, $C_{5,0}$ e $C_{6,0}$

Primeiramente considera-se a equação (5.11) e a condição descrita na equação (5.13) para a derivada da concentração de precursores porque é razoável considerar que a concentração de precursores não varia no instante inicial. A partir da equação (6.2), vem:

$$0 = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad (6.26)$$

$$C_{i,0} = \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0 \quad (6.27)$$

Onde considera-se $i = 1, 2, 3, \dots, 6$.

Observa-se que alguns testes preliminares tiveram que ser feitos para que fosse possível encontrar o valor ótimo para o passo, que foi de 10^{-5} s para as situações mais severas, ou seja, com a reatividade igual ou maior que 0,007 e 10^{-6} s para as demais. Vale ressaltar que nem todos os passos tiveram seus dados impressos, o que foi feito a cada mil ou 10 mil passos.

6.2 Solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com seis grupos de precursores usando o Método de Diferenças Finitas

As equações (6.2) e (6.3) são resolvidas através do método de diferenças finitas. Aplicando a aproximação de diferenças finitas, qual seja a equação (5.72) para a definição de derivada, bem como as equações (5.81) e (5.82) para a n -ésima derivada, para as Equações da Cinética Pontual Modificada para seis grupos de precursores vem:

$$\begin{aligned} \frac{1}{f_D} \left\{ \frac{n(t+2\Delta t) - 2n(t+\Delta t) + n(t)}{\Delta t^2} \right\} + \left(1 + \frac{f_A}{f_D} - \frac{1}{f_D} \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \left\{ \frac{n(t+\Delta t) - n(t)}{\Delta t} \right\} = \\ = \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t) + \sum_{i=1}^6 \frac{\lambda_i}{f_D} \left\{ \frac{C_i(t+\Delta t) - C_i(t)}{\Delta t} \right\} \end{aligned} \quad (6.28)$$

Onde foi considerado o caso de inserção de um degrau de reatividade como foi feito na seção (6.1). As seis equações dos precursores são definidas pela equação (6.5). Reescreve-se a equação (6.28):

$$\begin{aligned} n(t+2\Delta t) = & \left[-1 + \left(f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t + \left(f_D \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \Delta t^2 \right] n(t) + \\ & + \left[2 + \left(-f_D - f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t \right] n(t+\Delta t) + \sum_{i=1}^6 \left\{ \left[f_D \lambda_i \Delta t^2 - \lambda_i \Delta t \right] C_i(t) + \right. \\ & \left. + \left[\lambda_i \Delta t \right] C_i(t+\Delta t) \right\} \end{aligned} \quad (6.29)$$

Usando-se as definições (6.9), segue que:

$$n_{j+2} = \left[-1 + \left(f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t + \left(f_D \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \Delta t^2 \right] n_j + \left[2 + \left(-f_D - f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t \right] n_{j+1} + \sum_{i=1}^6 \left\{ [\lambda_i \Delta t] C_{i,j+1} + [f_D \lambda_i \Delta t^2 - \lambda_i \Delta t] C_{i,j} \right\} \quad (6.30)$$

Para a concentração dos precursores chega-se a equação (6.11) deduzida na seção anterior. Nota-se que as equações (6.30) e (6.11) continuam acopladas e devem ser resolvidas no mesmo passo. Observe o exemplo a seguir.

Dados os valores de $n_0, C_{1,0}, C_{2,0}, C_{3,0}, C_{4,0}, C_{5,0}, C_{6,0}, n_1, C_{1,1}, C_{2,1}, C_{3,1}, C_{4,1}, C_{5,1}$ e $C_{6,1}$, calcula-se no primeiro passo $n_2, C_{1,2}, C_{2,1}, C_{3,1}, C_{4,1}, C_{5,1}$ e $C_{6,1}$. Para tanto, é preciso calcular a densidade de nêutrons e a concentração dos precursores no mesmo passo.

$$n_2 = \left[-1 + \left(f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t + \left(f_D \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \Delta t^2 \right] n_0 + \left[2 + \left(-f_D - f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t \right] n_1 + \sum_{i=1}^6 \left\{ [\lambda_i \Delta t] C_{i,1} + [f_D \lambda_i \Delta t^2 - \lambda_i \Delta t] C_{i,0} \right\} \quad (6.31)$$

Note que o cálculo de $C_{1,2}, C_{2,1}, C_{3,1}, C_{4,1}, C_{5,1}$ e $C_{6,1}$ é idêntico ao que foi feito no Exemplo 6.2 e foi apresentado nas equações (6.20) até (6.25). Para se calcular $n_3, C_{1,3}, C_{2,3}, C_{3,3}, C_{4,3}, C_{5,3}$ ou $C_{6,3}$, no segundo passo, deve-se já ter feito antes o cálculo de $n_1, C_{1,1}, C_{2,1}, C_{3,1}, C_{4,1}, C_{5,1}, C_{6,1}, n_2, C_{1,2}, C_{2,2}, C_{3,2}, C_{4,2}, C_{5,2}$ e $C_{6,2}$ visto que:

$$n_3 = \left[-1 + \left(f_D + f_A - \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t + \left(f_D \frac{(\rho_0 - \beta)}{\Lambda} \right) \Delta t^2 \right] n_1 + \left[2 + \left(-f_D - f_A + \frac{(1-\beta)}{\Lambda} \right) \Delta t \right] n_2 + \sum_{i=1}^6 \left\{ [\lambda_i \Delta t] C_{i,2} + [f_D \lambda_i \Delta t^2 - \lambda_i \Delta t] C_{i,1} \right\} \quad (6.33)$$

$$C_{1,3} = (1 - \lambda_1 \Delta t) C_{1,2} + \frac{\beta_1}{\Lambda} n_2 \Delta t \quad (6.34)$$

$$C_{2,3} = (1 - \lambda_2 \Delta t) C_{2,2} + \frac{\beta_2}{\Lambda} n_2 \Delta t \quad (6.35)$$

$$C_{3,3} = (1 - \lambda_3 \Delta t) C_{3,2} + \frac{\beta_3}{\Lambda} n_2 \Delta t \quad (6.36)$$

$$C_{4,3} = (1 - \lambda_4 \Delta t) C_{4,2} + \frac{\beta_4}{\Lambda} n_2 \Delta t \quad (6.37)$$

$$C_{5,3} = (1 - \lambda_5 \Delta t) C_{5,2} + \frac{\beta_5}{\Lambda} n_2 \Delta t \quad (6.38)$$

$$C_{6,3} = (1 - \lambda_6 \Delta t) C_{6,2} + \frac{\beta_6}{\Lambda} n_2 \Delta t \quad (6.39)$$

Nota-se que a técnica de diferenças finitas é aplicada ao sistema de equações diferenciais acopladas que constituem a Cinética Pontual Modificada sem que haja a necessidade de desacoplar as equações, desde que os seus respectivos valores sejam calculados no mesmo passo.

As condições iniciais expressas nas equações (5.11) e (6.27) permanecem válidas para o caso das equações da Cinética Pontual Modificada e permitem determinar os valores de n_0 , $C_{1,0}$, $C_{2,0}$, $C_{3,0}$, $C_{4,0}$, $C_{5,0}$ e $C_{6,0}$. Para determinar o valor de n_1 considera-se a equação (5.14) que determina a condição inicial para a derivada primeira da densidade de nêutrons. Aplica-se a aproximação de diferenças finitas, a equação (6.71), obtendo-se:

$$\frac{n_1 - n_0}{\Delta t} = \frac{\rho_0}{\Lambda} n_0 \quad (6.40)$$

$$n_1 = \left(1 + \frac{\rho_0}{\Lambda} \Delta t \right) n_0 \quad (6.41)$$

Usa-se o resultado da equação (5.13), obtendo-se:

$$C_{i,1} = C_{i,0} = \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0 \quad (6.42)$$

Onde considera-se $i = 1, 2, 3, \dots, 6$.

Aqui também foram necessários os testes preliminares para que fosse possível encontrar o valor ótimo para o passo, que foi de 10^{-5} s para as situações mais severas, ou seja, com a reatividade igual ou maior que 0,007 e 10^{-6} s para as menores que 0,007. Vale ressaltar que nem todos os passos tiveram seus dados impressos, o que foi feito a cada mil ou 10 mil passos.

7 Resultados

Os resultados são obtidos, nesta tese, para os modelos da cinética pontual modificada e da cinética pontual clássica com um grupo de precursores. Para os dois modelos o cálculo é feito pelo método analítico da Transformada de Laplace e pelo método de Diferenças Finitas. A situação escolhida para a análise foi a inserção de um degrau de reatividade devido a sua simplicidade e a sua aplicabilidade. É um caso compatível com as situações de início de operação de um reator nuclear que sempre ocorre após procedimentos de troca do combustível nuclear e manutenção porque a reatividade inserida foi positiva. Os valores escolhidos reproduzem uma situação severa, que implica a validade do modelo testado para casos reais (menos severos).

Embora o uso de seis grupos de precursores seja o mais próximo da realidade, foi adotado no capítulo 5 o uso de apenas um grupo de precursores. A maior simplicidade do modelo diminui o problema da rigidez citada na seção 5.3 e permite uma análise mais completa dos resultados, viabilizando a validação das equações da cinética pontual modificada. No capítulo 6 foi feita a análise para seis grupos de precursores usando apenas a técnica de diferenças finitas.

As condições iniciais foram deduzidas ao longo deste trabalho e podem ser confirmadas a partir de DUDERSTADT & HAMILTON [2], HENRY [3] e STACEY [27], consistindo nas equações (5.11), (5.13), (5.14), (5.67), (5.68), (6.27), (6.41) e (6.42). Considera-se em todas elas $n_0 = 1$, o que é usualmente praticado em diversos artigos presentes na literatura. ESPINOSA-PAREDES *et. al* [14], KINARD & ALLEN [7] e CHAO e ATTARD [4] são apenas uma reduzida amostra destes artigos.

O modelo da cinética pontual fracionária descrito por ESPINOSA-PAREDES *et. al* [14] também utiliza os mesmos parâmetros cinéticos do modelo da cinética pontual clássica. O motivo consiste no fato de que após a separação de variáveis a equação espacial é a mesma e

também observa-se que os parâmetros relacionados com os precursores são obtidos diretamente dos grupos de precursores.

Uma vez que a análise da cinética pontual com um grupo de precursores utiliza de um grande número de resultados e o mesmo ocorre com a análise da cinética pontual com seis grupos de precursores, em prol de uma abordagem mais detalhada e didática, as análises serão feitas em separado.

7.1 Resultados com um grupo de precursores

Os resultados são obtidos para os modelos da cinética pontual modificada e clássica com um grupo de precursores. Os parâmetros cinéticos foram descritos no capítulo 4 e seus valores apresentados na Tabela 7.1. Os valores considerados para a seção de choque de absorção e o coeficiente de difusão correspondem ao espectro médio das seções de choque de um típico núcleo de um reator PWR de acordo com DUDERSTADT & HAMILTON [2] e STACEY [27].

Tabela 7.1: Parâmetros usados nos testes com um grupo de precursores

Parâmetro	Valor
λ	$0,0810958 \text{ s}^{-1}$
Λ	$0,002 \text{ s}$
Σ_a	$0,0139 \text{ cm}^{-1}$
D	10 cm
v	$3 \cdot 10^5 \text{ cm/s}$
β	$0,007$
f_A	4167 s^{-1}

No primeiro cálculo realizado foi escolhido um degrau de reatividade igual a 0,001, ou seja 100 pcm (por cem mil). Os resultados para as equações da Cinética Pontual Clássica foram obtidos pela técnica da transformada de Laplace e pelo método de Diferenças Finitas. Já aqueles resultados para as equações da Cinética Pontual Modificada foram obtidos com dois valores distintos para a frequência de transporte de nêutrons, que foram 10^4 s^{-1} e 10^3 s^{-1} . Levando-se em conta os resultados experimentais disponíveis na vasta literatura da área, a

faixa de valores para a frequência de transporte de nêutrons vai de 10^6 s^{-1} até 10^3 s^{-1} . As condições mais severas para o teste das equações da Cinética Pontual Modificada implicam valores menores para a frequência de transporte de nêutrons. Para ambos os valores foram obtidos os resultados pela técnica da transformada de Laplace e pelo método de Diferenças Finitas, onde foi usado um passo de 10^{-6} s . Resultados numéricos são apresentados na tabela 7.2.

Tabela 7.2: Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para um grupo de precursores para a inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.

Modelo e metodologia	t = 0,4s	t = 1s	t = 10s	t = 20s	t = 40s	t = 100s
Cinética Clássica / Transformada de Laplace	1,11732	1,16485	1,31865	1,50329	1,95374	4,28883
Cinética Clássica / Diferenças Finitas	1,11733	1,16485	1,31865	1,50328	1,95372	4,28874
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^4 s^{-1} / Transformada de Laplace	1,09793	1,15279	1,31288	1,49456	1,93681	4,21512
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^4 s^{-1} / Diferenças Finitas	1,09793	1,15280	1,31288	1,49455	1,93679	4,21503
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^3 s^{-1} / Transformada de Laplace	1,03789	1,07982	1,26877	1,42790	1,80829	3,67270
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^3 s^{-1} / Diferenças Finitas	1,03790	1,07983	1,26877	1,42789	1,80828	3,67263

Note que a diferença entre os resultados obtidos por meio da técnica da transformada de Laplace e os resultados obtidos por meio do método de Diferenças Finitas é muito pequena e os valores coincidem até a terceira casa decimal, no mínimo. Algumas vezes chegam a ser idênticos. Isso assegura a precisão na aplicação dos métodos, mas dificulta a percepção visual na representação gráfica, que em escala compatível, as curvas ficam sobrepostas. Nas figuras

7.1, 7.2 e 7.3 temos os gráficos ampliados a fim de ser possível perceber as curvas sem sobreposição. Todavia, apesar da escala estar muito ampliada, as curvas estão muito próximas.

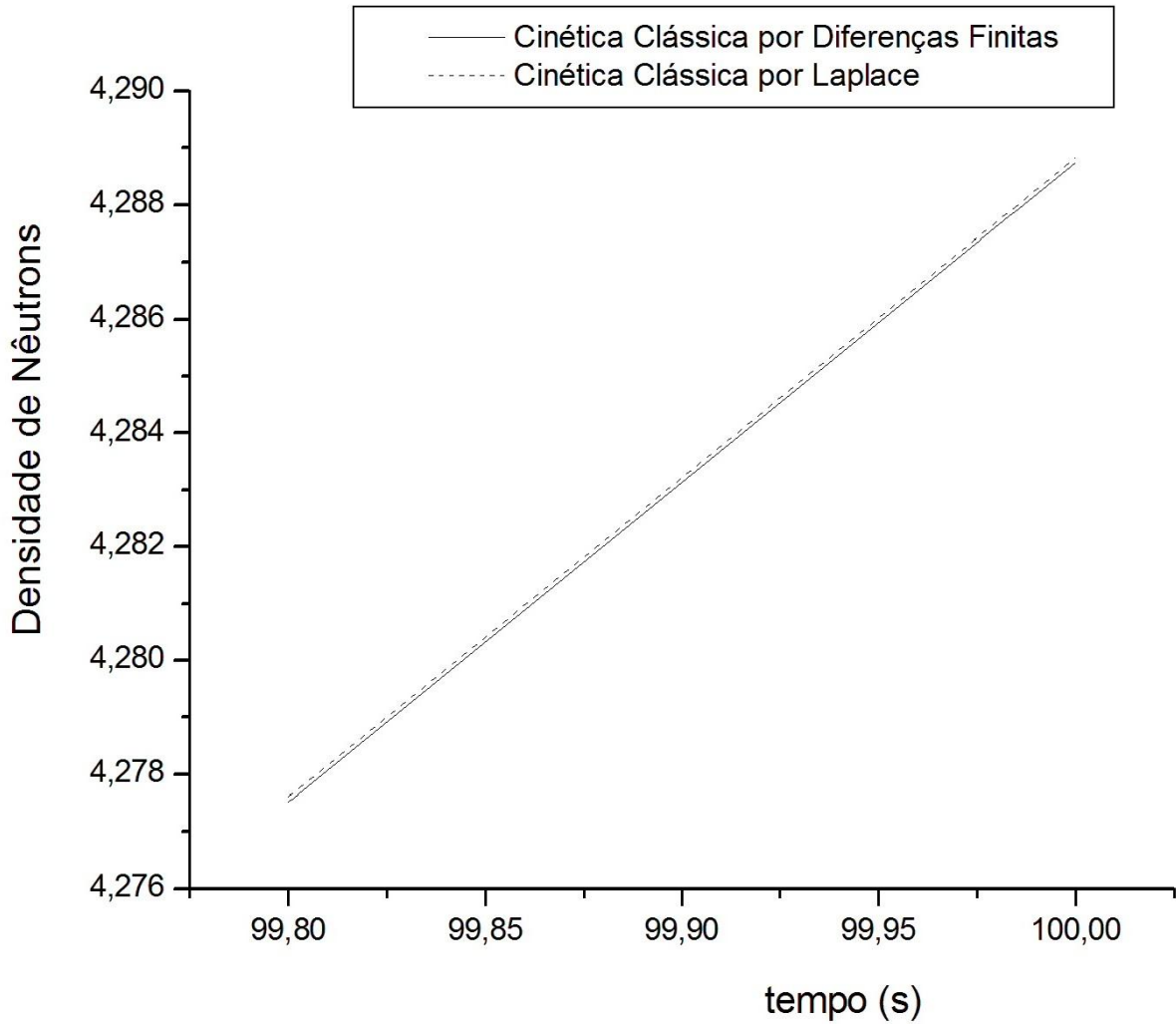


Figura 7.1: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Clássica por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.

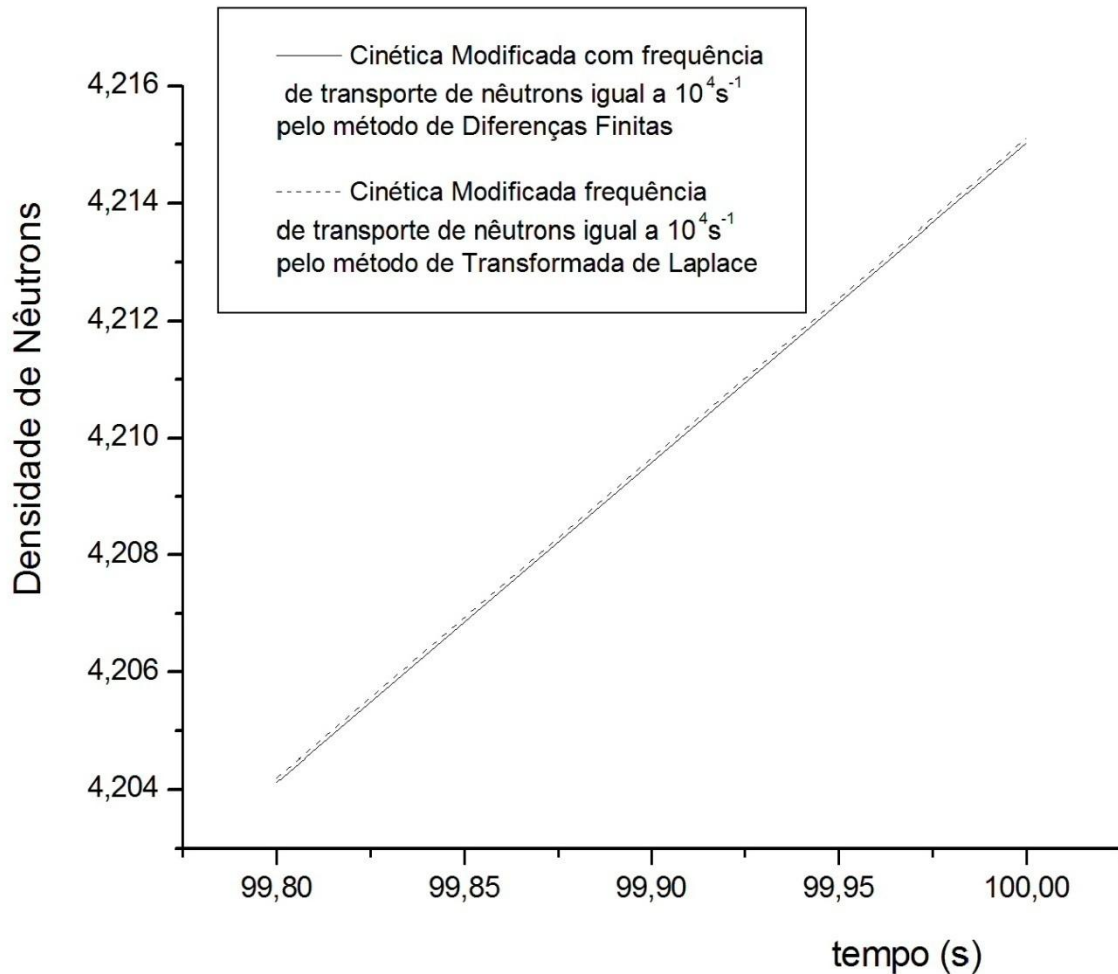


Figura 7.2: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s⁻¹ por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.

Uma vez que não é possível distinguir graficamente os resultados obtidos por meio do método de Diferenças Finitas daqueles resultados obtidos através da técnica da transformada de Laplace não será especificado qual foi a metodologia empregada nos gráficos subsequentes aquele apresentado na figura 7.3. Simplesmente serão comparados os resultados da solução das Equações da Cinética Pontual Clássica com os resultados da solução das Equações da Cinética Pontual Modificada (nas situações da frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s⁻¹ e 10^3 s⁻¹).

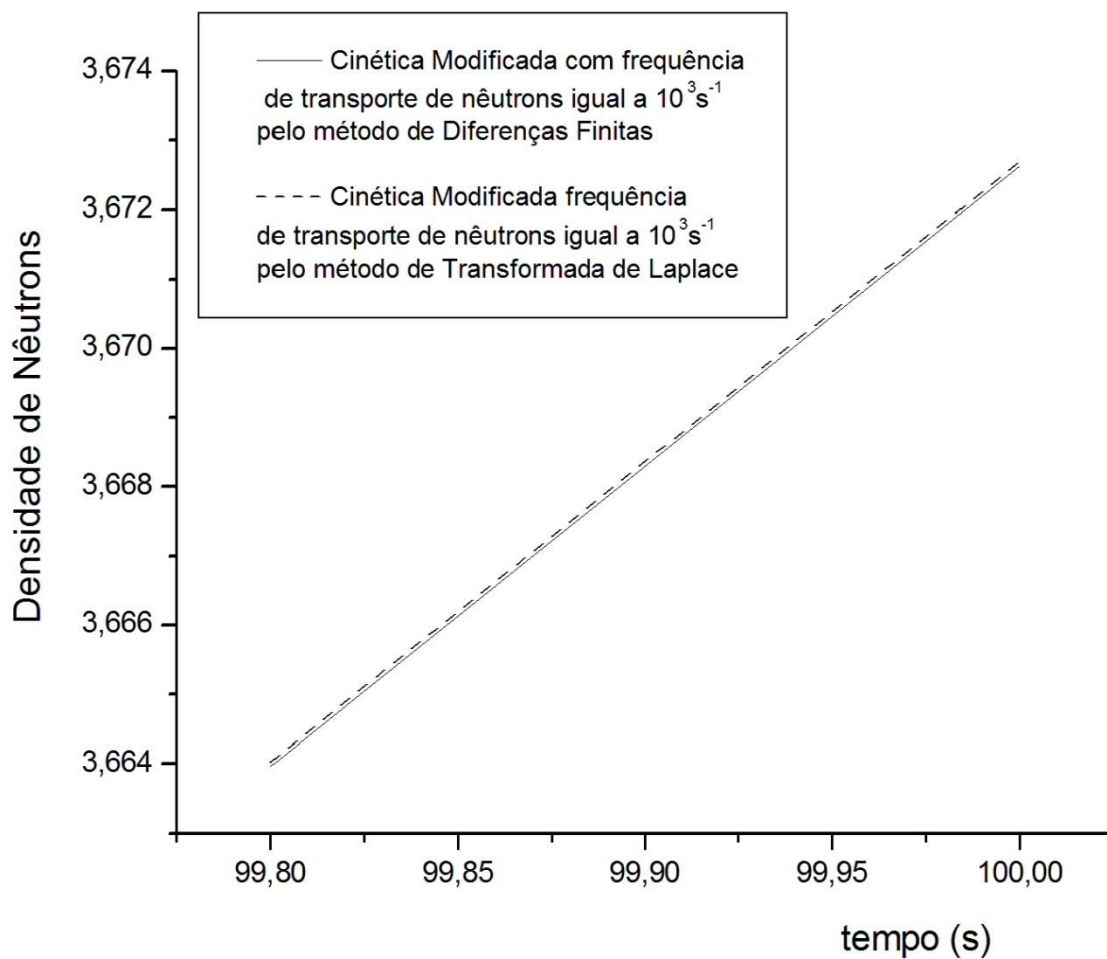


Figura 7.3: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80 \text{ s}$ até $t = 100,00 \text{ s}$ para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s^{-1} por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.

No gráfico apresentado na figura 7.4 observa-se que, em relação ao cálculo feito com as Equações da Cinética Pontual Clássica, os cálculos feitos com as Equações da Cinética Pontual Modificada para um grupo de precursores e uso da frequência transporte de nêutrons igual a 10^4 s se aproximam mais do resultado clássico do que os cálculos feitos com a frequência de transporte de nêutrons igual 10^3 s . Os resultados apresentados correspondem a um intervalo de tempo de 0 até 100 s e um passo igual a 0,2 s.

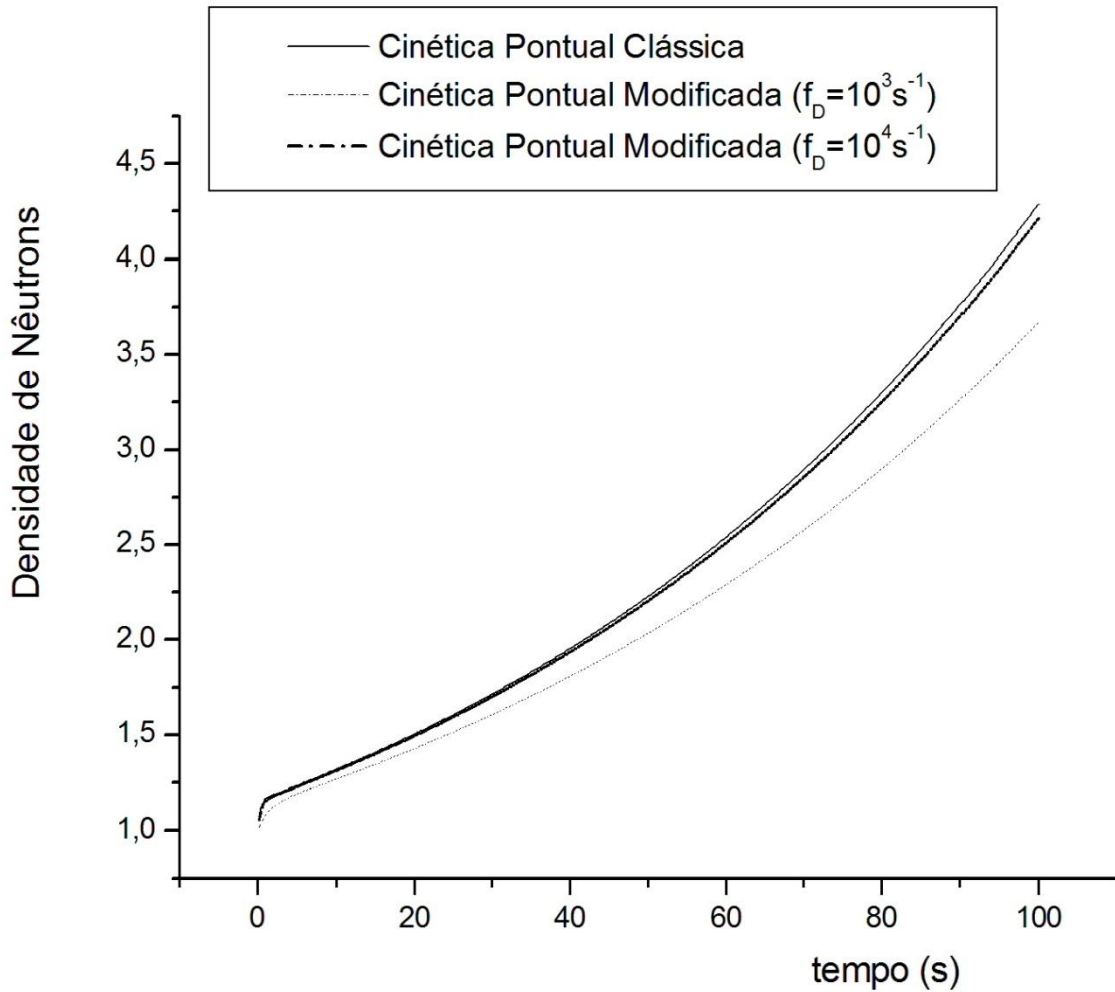


Figura 7.4: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0 \text{ s}$ até $t = 100 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.

Na figura 7.5 foi feito um detalhamento dos resultados porque o gráfico gerado está no intervalo de tempo de 0 até 20 s com o mesmo passo de 0,2 s. Nota-se que os resultados correspondentes ao cálculo realizado com as Equações da Cinética Pontual com um grupo de precursores e frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s tem uma curva com início mais suave do que as outras duas curvas.

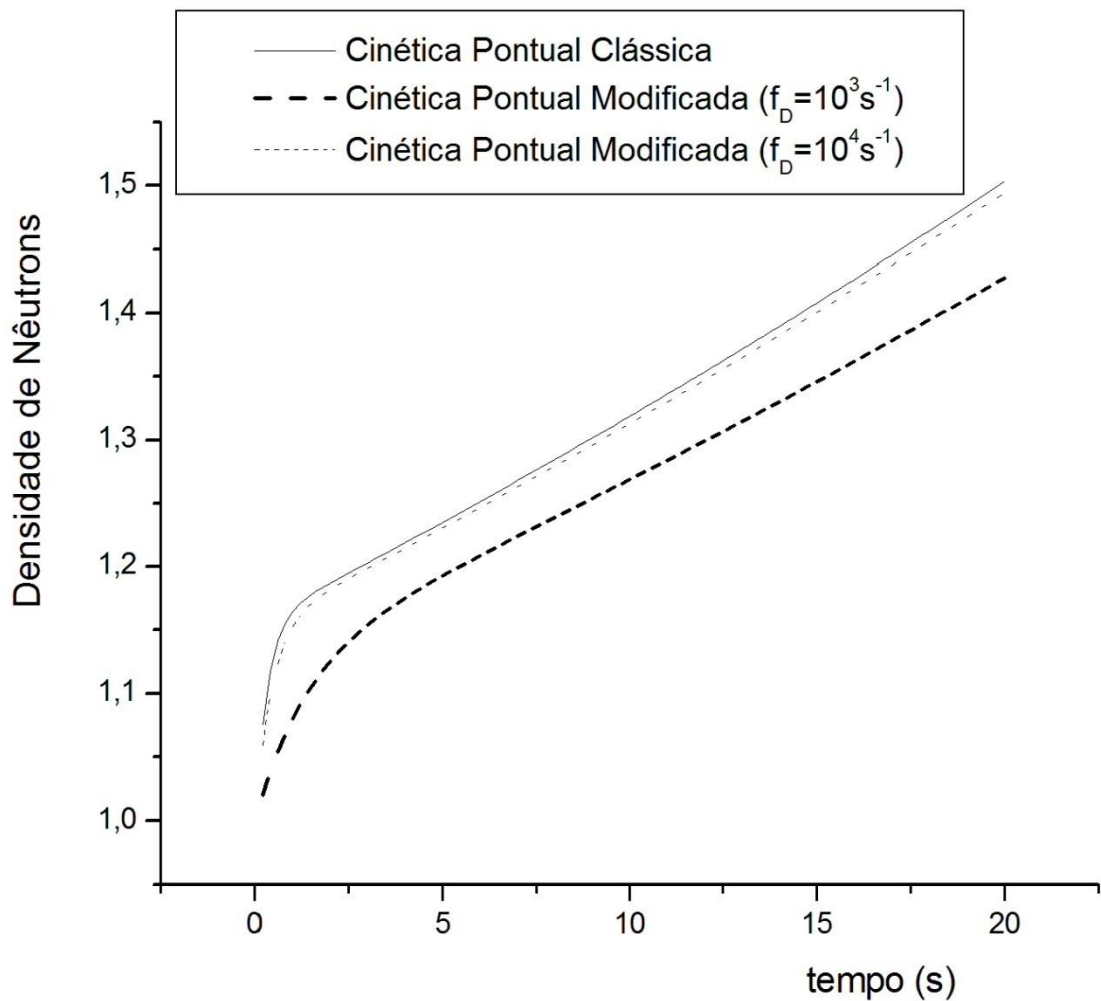


Figura 7.5: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0 \text{ s}$ até $t = 20 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.

No gráfico apresentado na figura 7.6 as três curvas estão muito afastadas neste intervalo de tempo compreendido entre 80 s e 100 s. Assim como nos gráficos apresentados nas figuras 7.4 e 7.5 os resultados correspondentes às Equações da Cinética Pontual Modificada com um grupo de precursores e frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s^{-1} resultam em uma curva mais afastada das outras duas e com valores menores.

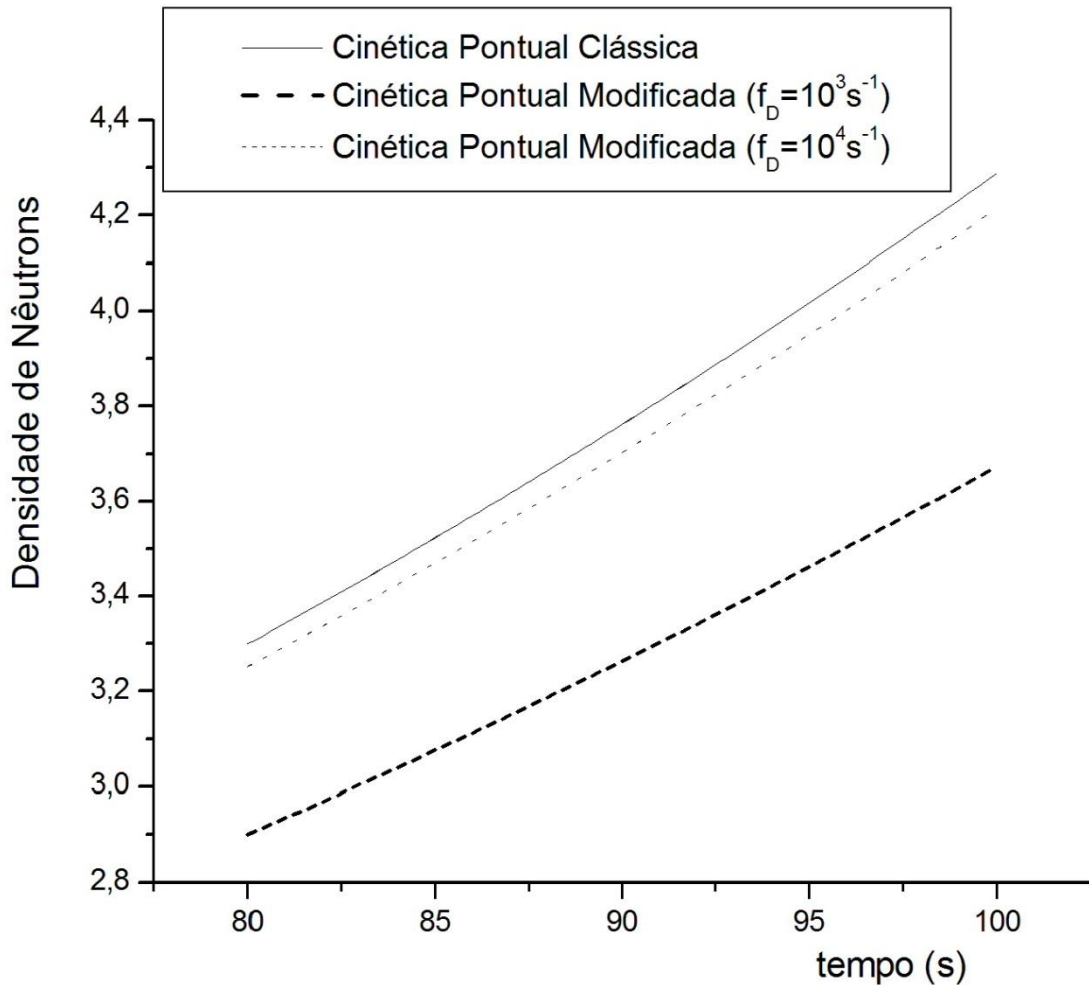


Figura 7.6: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 80 \text{ s}$ até $t = 100 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 100 pcm.

No cálculo seguinte foi escolhido um degrau de reatividade igual a 0,003, ou seja 300 pcm com as Equações da Cinética Pontual (Clássica e Modificada) com um grupo de precursores. Todos os resultados experimentais citados acima foram obtidos pela técnica da transformada de Laplace e pelo método de Diferenças Finitas. Assim como no caso anterior, as condições mais severas para o teste das equações da Cinética Pontual Modificada implicam valores menores para a frequência de transporte de nêutrons. Para ambos os valores foram obtidos os resultados pela técnica da transformada de Laplace e pelo método de Diferenças Finitas, onde foi usado um passo de 10^{-6} s . Resultados numéricos são apresentados na tabela 7.3.

Tabela 7.3: Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para um grupo de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

Modelo e metodologia	t = 0,4s	t = 1s	t = 10s	t = 20s	t = 40s	t = 100s
Cinética Clássica / Transformada de Laplace	1,41608	1,67701	2,92783	5,17182	16,1376	490,2544
Cinética Clássica / Diferenças Finitas	1,41610	1,67703	2,92782	5,17179	16,1373	490,2373
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^4s^{-1} / Transformada de Laplace	1,33412	1,59540	2,84169	4,95610	15,0760	424,3557
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^4s^{-1} / Diferenças Finitas	1,33413	1,59542	2,84161	4,95606	15,0758	424,3413
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^3s^{-1} / Transformada de Laplace	1,11848	1,26404	2,32252	3,71272	9,47337	157,3770
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^3s^{-1} / Diferenças Finitas	1,11848	1,26404	2,32252	3,71270	9,47314	157,3697

Nos gráficos das figuras 7.7, 7.8 e 7.9 foi feita uma comparação entre os resultados obtidos por meio da técnica da Transformada de Laplace e do Método de Diferenças Finitas. A escala adotada é sempre bem ampliada, uma vez que os dados utilizados foram muito próximos, ou seja, um intervalo de tempo reduzido. No caso da figura 7.7, a comparação é feita para os resultados das Equações da Cinética Pontual Clássica para um grupo de precursores.

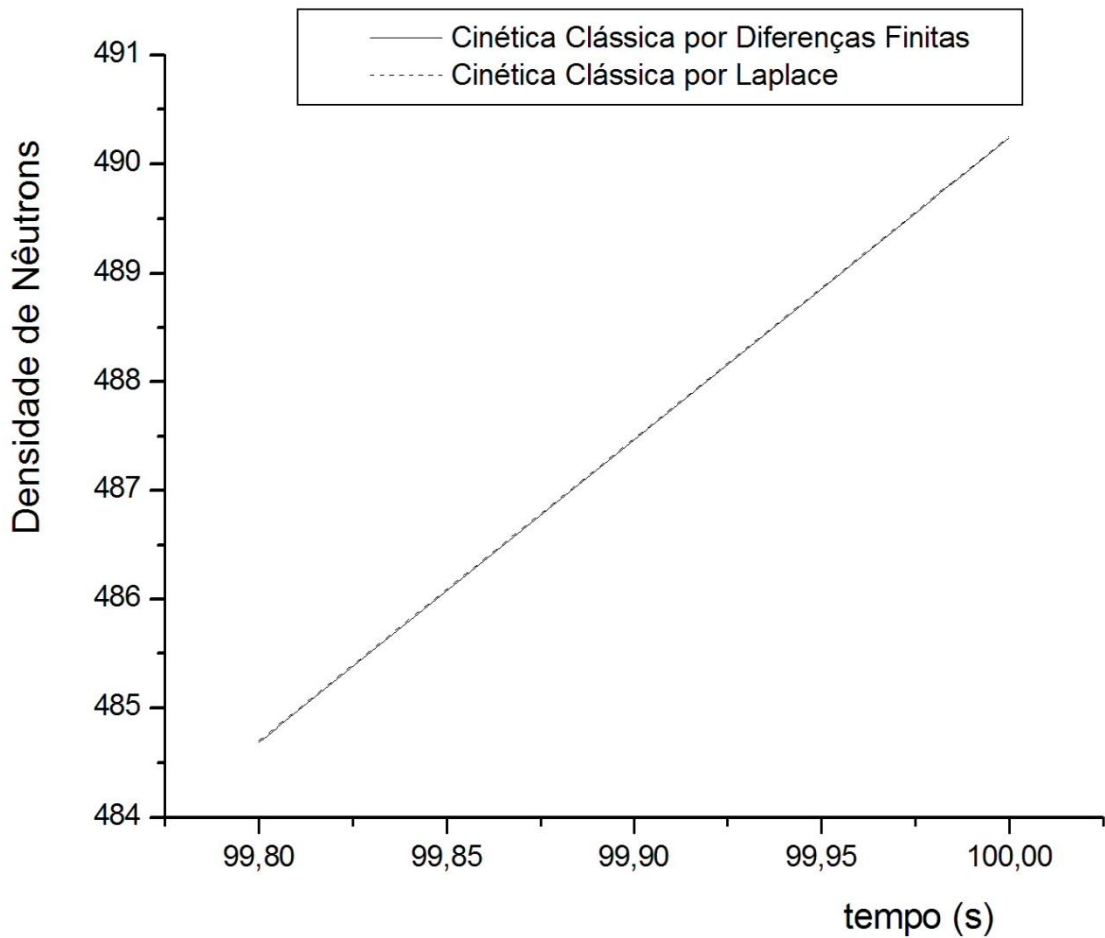


Figura 7.7: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Clássica por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

Na figura 7.8 foi feita a comparação entre os resultados obtidos por meio da técnica de Transformada de Laplace e os resultados obtidos por meio do método de Diferenças Finitas para a solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com um grupo de precursores e o uso de uma frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s⁻¹ numa situação de inserção de um degrau de reatividade constante e igual a 300 pcm.

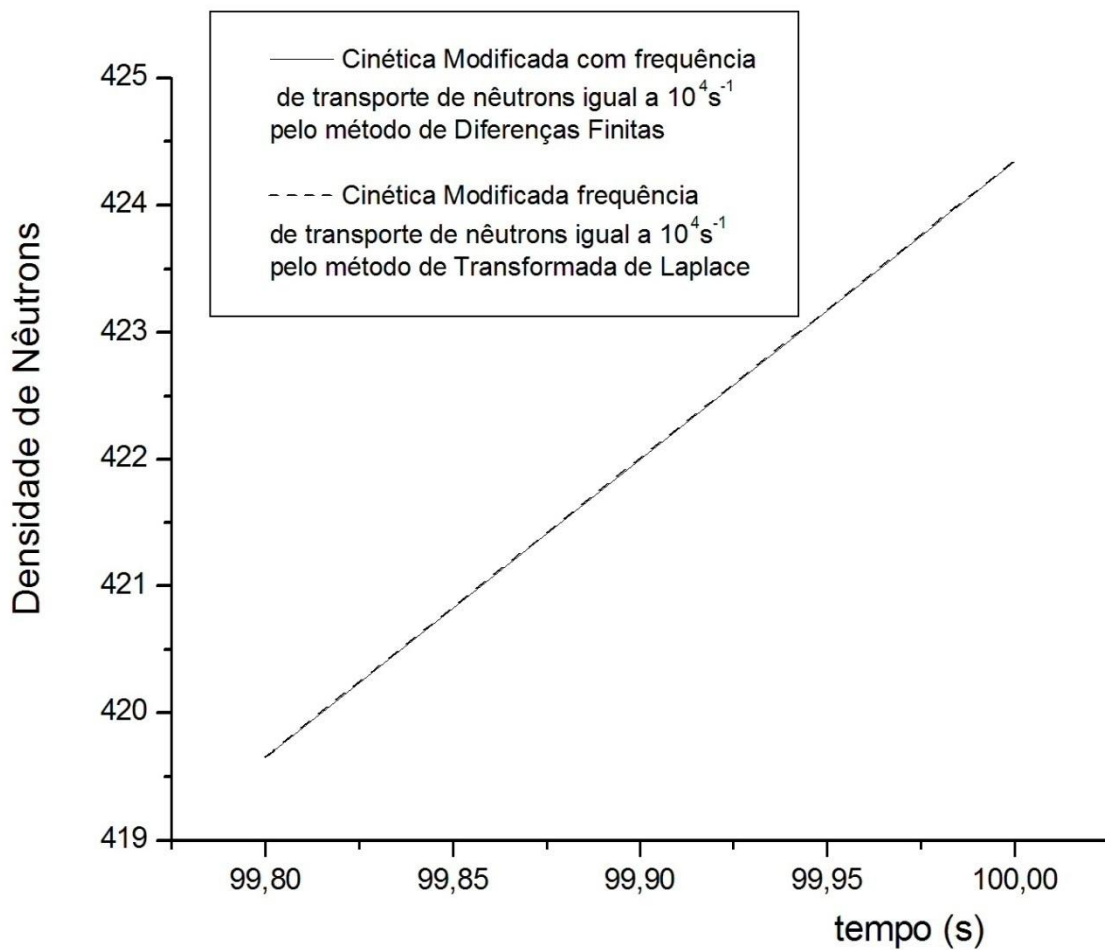


Figura 7.8: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s^{-1} por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

Da mesma forma que nas figuras 7.7 e 7.8, também na figura 7.9 foi feita a comparação entre os resultados obtidos por meio da técnica de Transformada de Laplace e os resultados obtidos por meio do método de Diferenças Finitas, mas desta vez para a solução das Equações da Cinética Pontual Modificada com um grupo de precursores e o uso de uma frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s^{-1} numa situação de inserção de um degrau de reatividade constante e igual a 300 pcm.

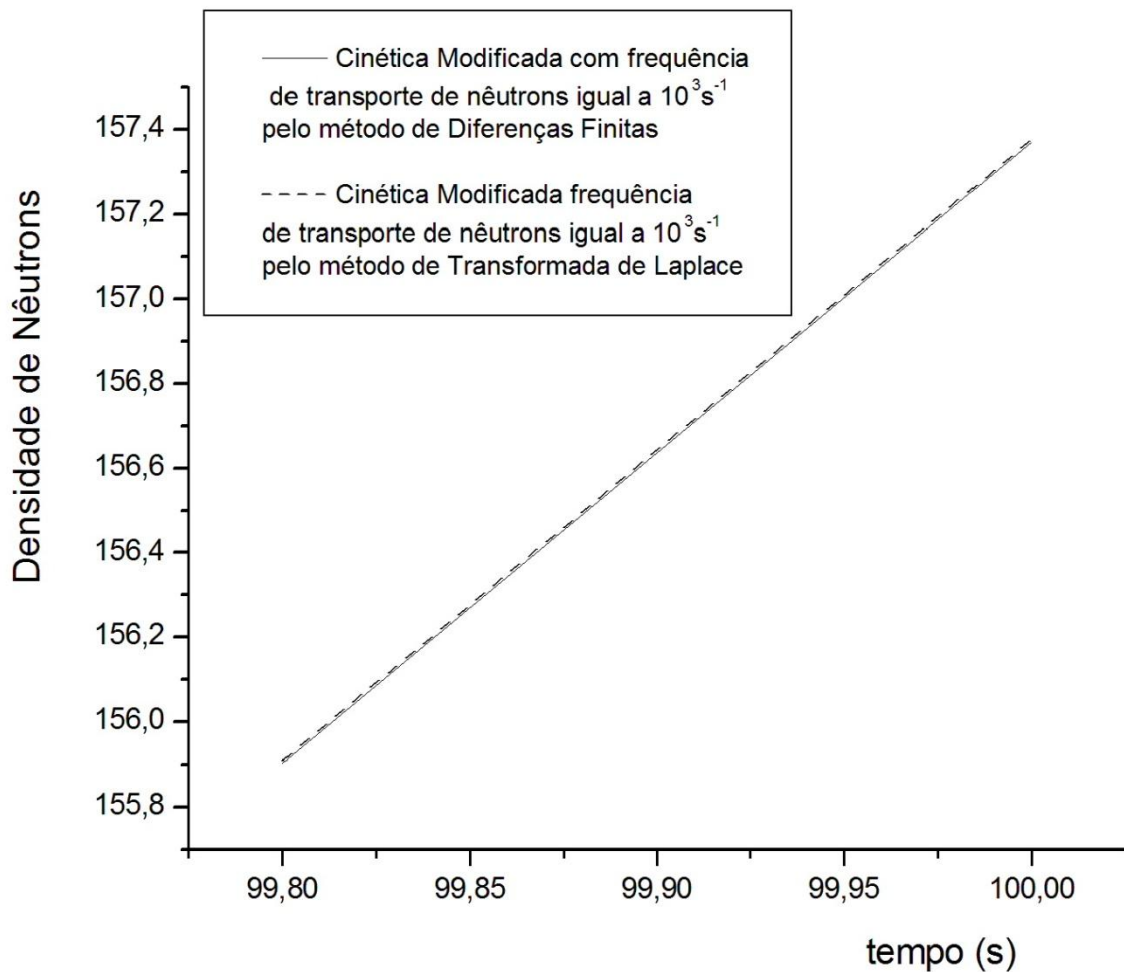


Figura 7.9: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s^{-1} por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

Uma vez que nos gráficos das figuras 7.7, 7.8 e 7.9 as curvas correspondentes obtidas por meio da técnica da Transformada de Laplace e por meio do método de Diferenças Finitas estão praticamente sobrepostas, fica impossível distinguir visualmente as curvas. Por isso, nos gráficos apresentados nas figuras 7.10, 7.11 e 7.12 não foi especificado o método adotado porque em ambos (Laplace e Diferenças Finitas) obtém-se os mesmos resultados em termos da resolução dos gráficos.

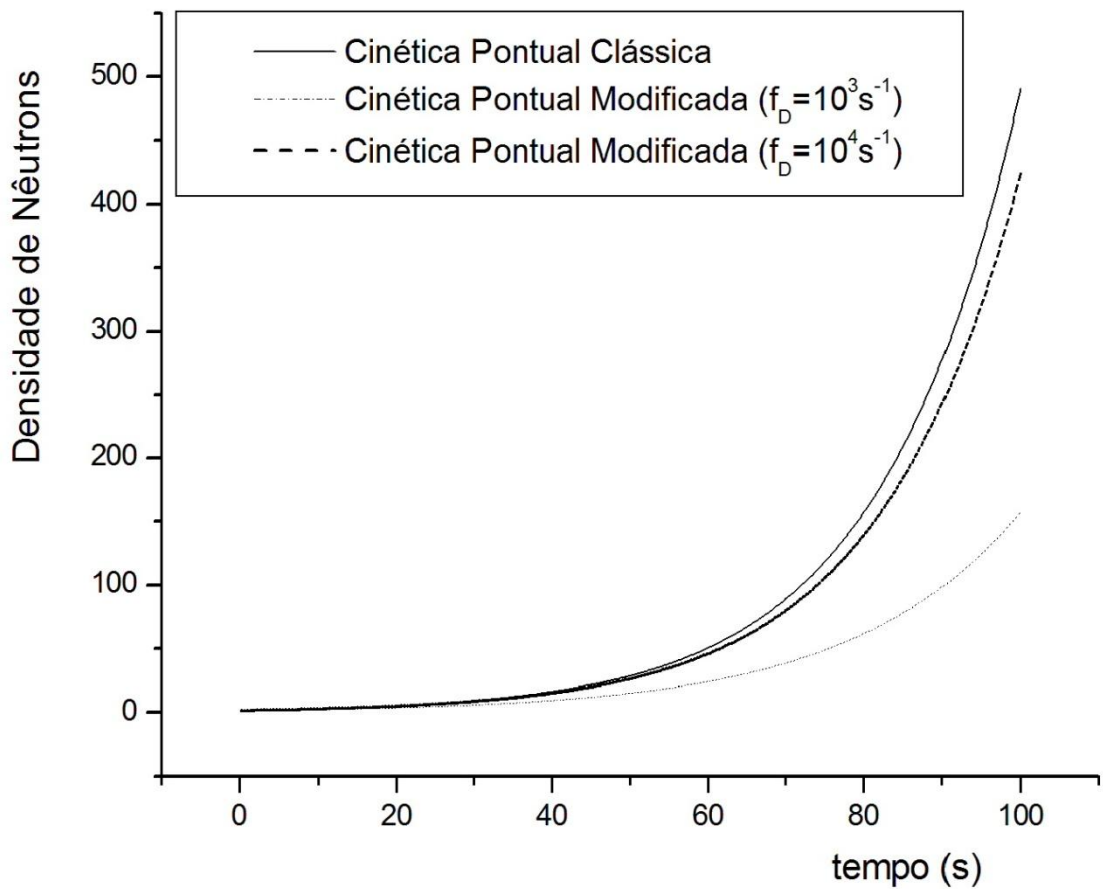


Figura 7.10: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0 \text{ s}$ até $t = 100 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

Nos gráficos apresentados nas figuras 7.11 e 7.12 é feito um detalhamento em regiões distintas para os resultados obtidos pelas Equações da Cinética Pontual Clássica, Equações da Cinética Pontual Modificada com o uso de uma frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s^{-1} e também com o uso de uma frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s^{-1} para a inserção de um degrau de reatividade constante e igual a 300 pcm.

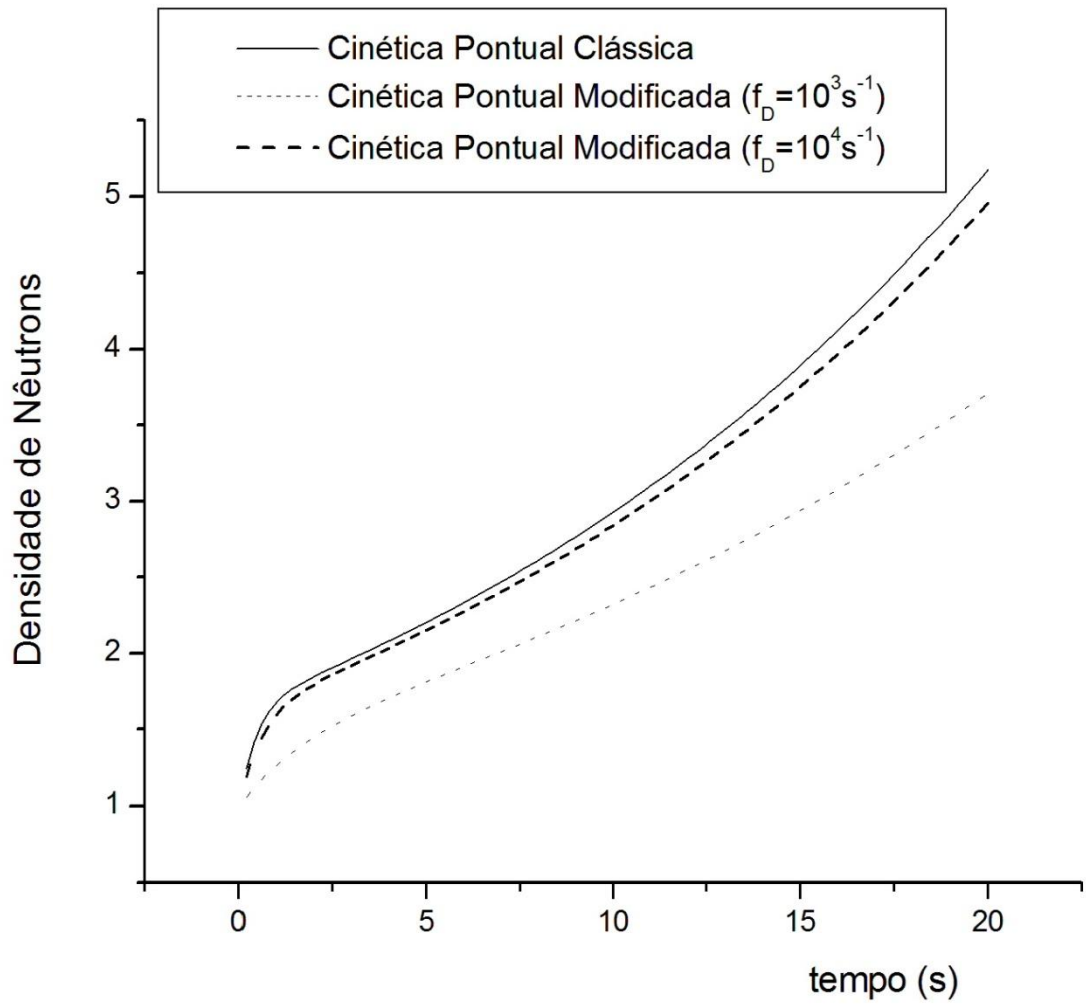


Figura 7.11: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0 \text{ s}$ até $t = 20 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

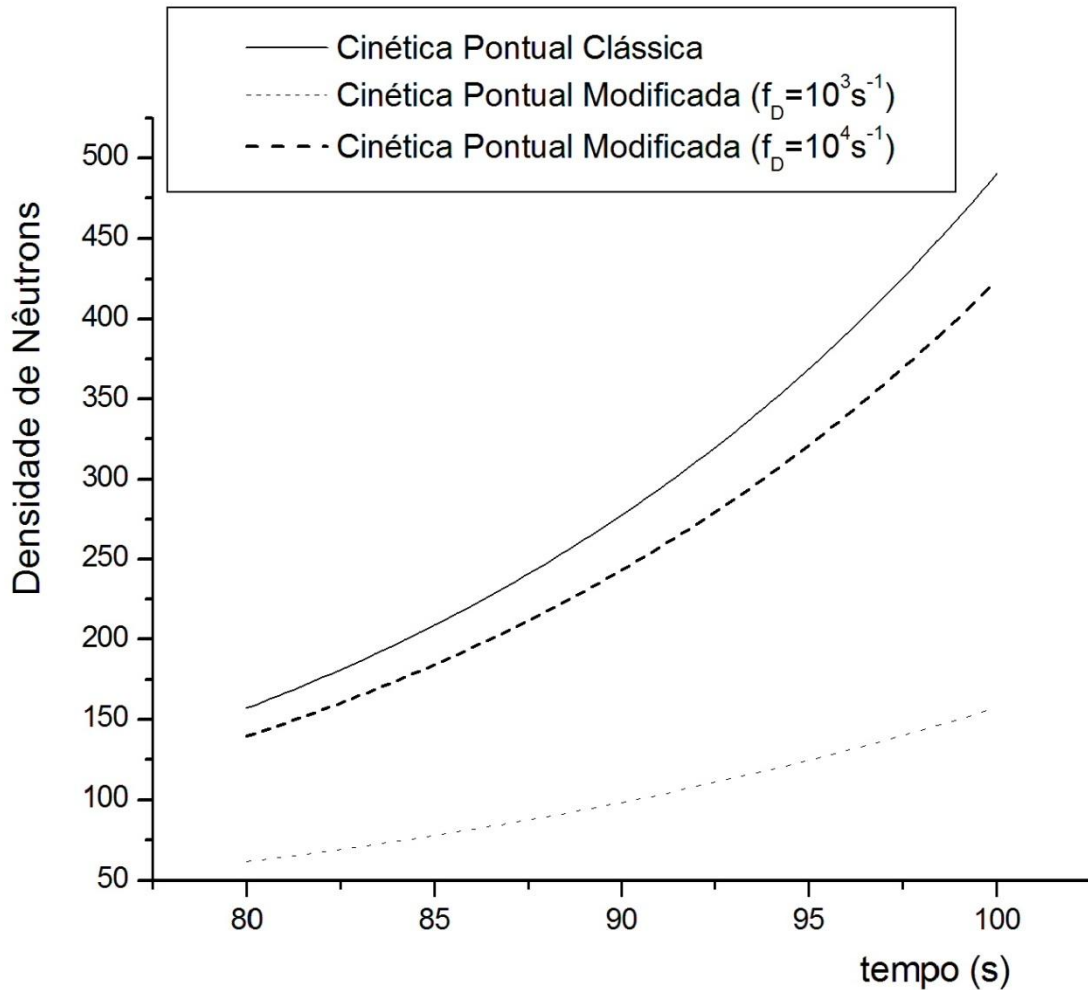


Figura 7.12: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 80 \text{ s}$ até $t = 100 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

A última situação analisada para a solução das Equações da Cinética Pontual com um grupo de precursores é a inserção de um degrau de reatividade igual a 700 pcm. Neste caso a situação modelada é muito severa. Uma amostra dos resultados obtidos é apresentada na tabela 7.4. Os valores apresentados correspondem aos mesmos tempos que foram adotados nas tabelas 7.2 e 7.3. Note que os resultados obtidos estão com uma ordem de grandeza bem maior do que nos casos anteriores.

Observando atentamente os resultados expressos na tabela 7.4 é possível perceber que para os todos os valores apresentados que foram obtidos por meio da técnica da transformada de Laplace em comparação com os resultados correspondentes obtidos por meio do método de Diferenças Finitas apresentam uma divergência apenas no terceiro ou no quarto algarismo significativo. Por conta desta diferença muito pequena, foi feito o gráfico no intervalo de tempo

de 99,80 até 100,00 s que é apresentado na figura 7.13, para tentar verificar a maior diferença entre as curvas com a máxima resolução e situação mais severa.

Vale destacar que nesta vez, para o Método de Diferenças Finitas, foi usado um passo de 10^{-5} s. Lembrando que os valores foram impressos a cada 10 mil passos.

Tabela 7.4: Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para um grupo de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.

Modelo e metodologia	t = 0,4s	t = 1s	t = 10s	t = 20s	t = 40s	t = 100s
Cinética Clássica / Transformada de Laplace	2,41053	4.66457	531.6637	74130.08	1,44110 $\times 10^9$	1,05875 $\times 10^{22}$
Cinética Clássica / Diferenças Finitas	2,41053	4,66452	531,5985	74111,87	1,440394 $\times 10^9$	1,057454 $\times 10^{22}$
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^4s^{-1} / Transformada de Laplace	2,02981	3,64807	216,1245	13975,79	5,84328 $\times 10^7$	4,27069 $\times 10^{18}$
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^4s^{-1} / Diferenças Finitas	2,02980	3,64804	216,1055	13973,34	5,841232 $\times 10^7$	4,266944 $\times 10^{18}$
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^3s^{-1} / Transformada de Laplace	1,30083	1,75747	16,81870	136,8693	9001,383	2,56028 $\times 10^9$
Cinética Modificada com freqüência de transporte igual a 10^3s^{-1} / Diferenças Finitas	1,30083	1,75747	16,81832	136,8631	9000,572	2,559709 $\times 10^9$

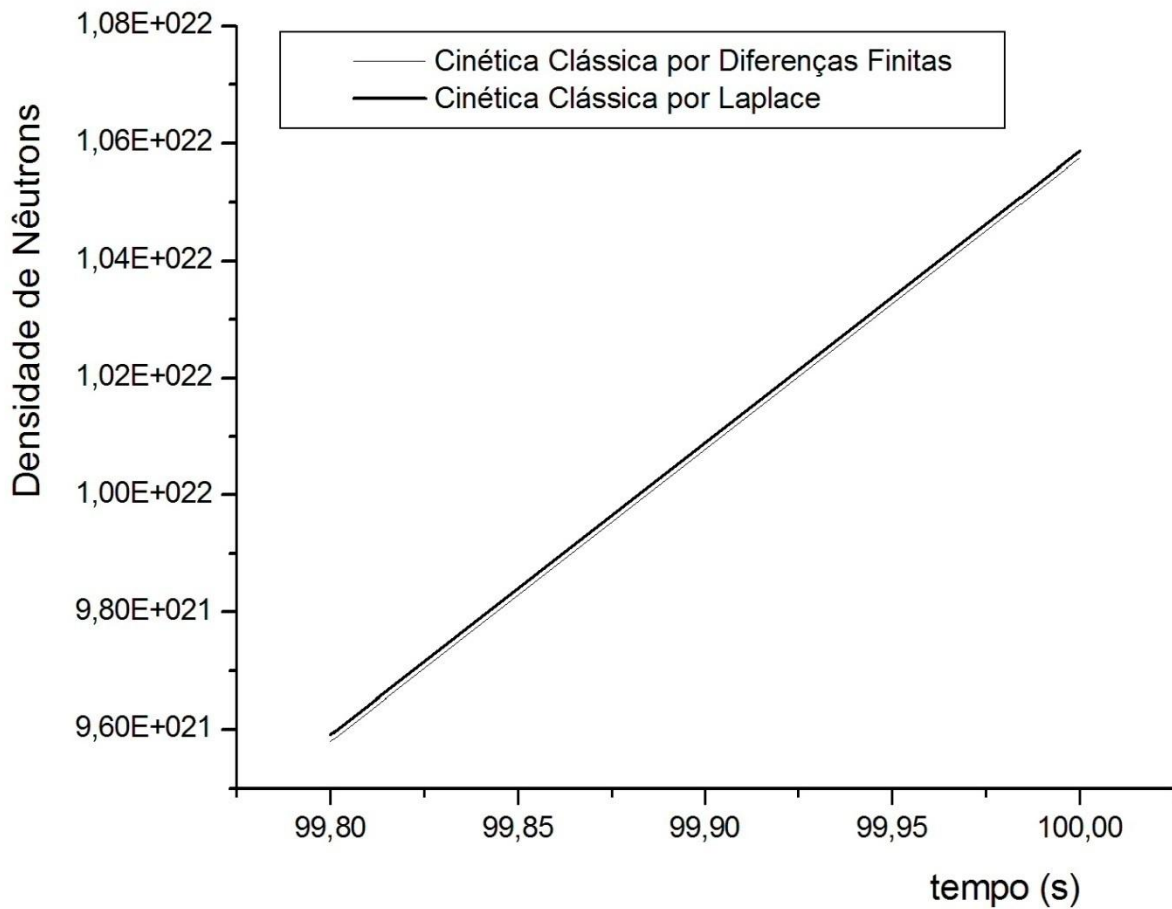


Figura 7.13: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Clássica por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.

Nas figuras 7.14 e 7.15 também foram apresentados gráficos da densidade de nêutrons em função do tempo em um intervalo de 99,80 s até 100,00 s. A comparação entre os resultados da Equação da Cinética Pontual Modificada obtida por meio da técnica da Transformada de Laplace e do Método de Diferenças Finitas demonstra que são idênticos, levando-se em conta a resolução gráfica, ou seja, a diferença mínima que ocorre não é perceptível nos gráficos com intervalos de tempo maiores.

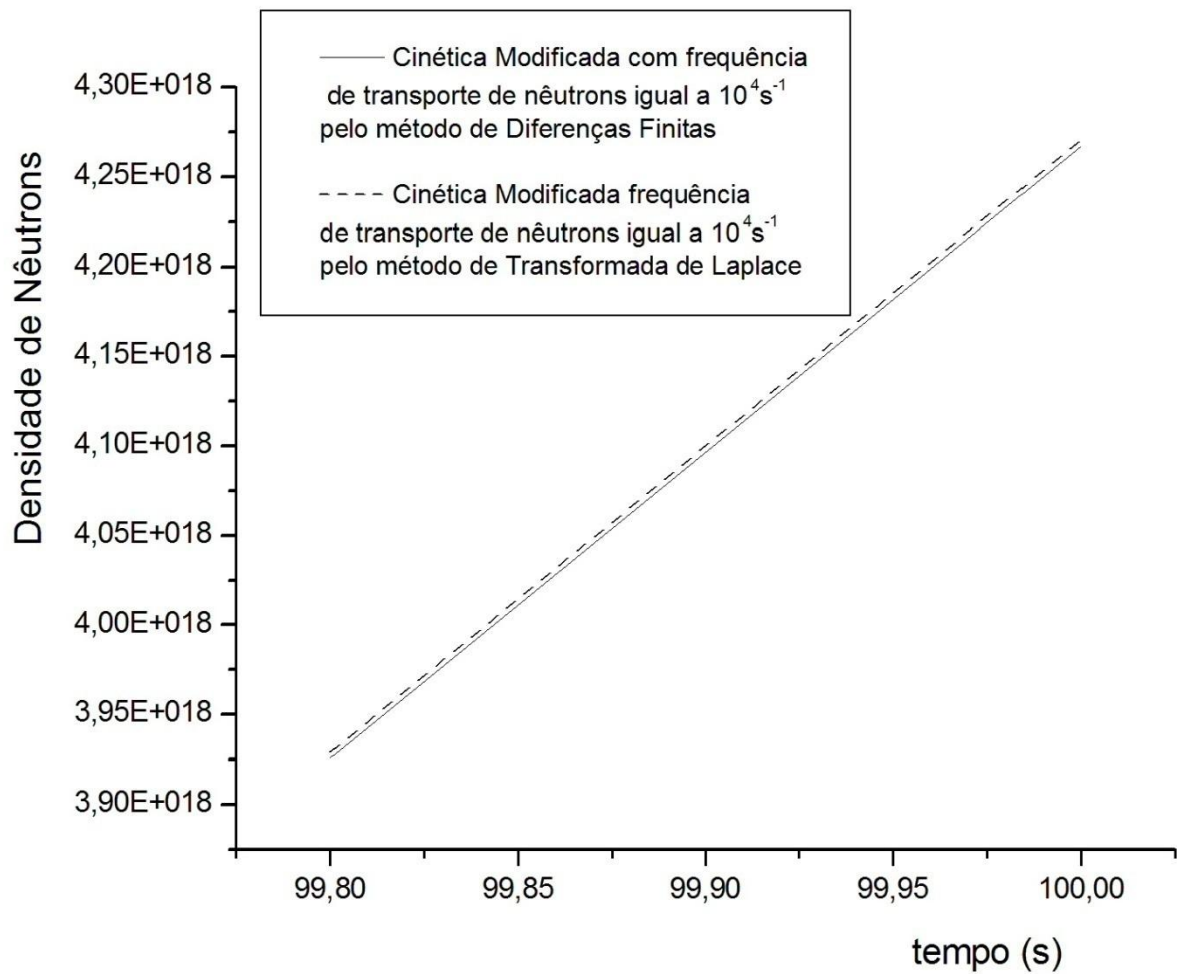


Figura 7.14: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^4 s^{-1} por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.

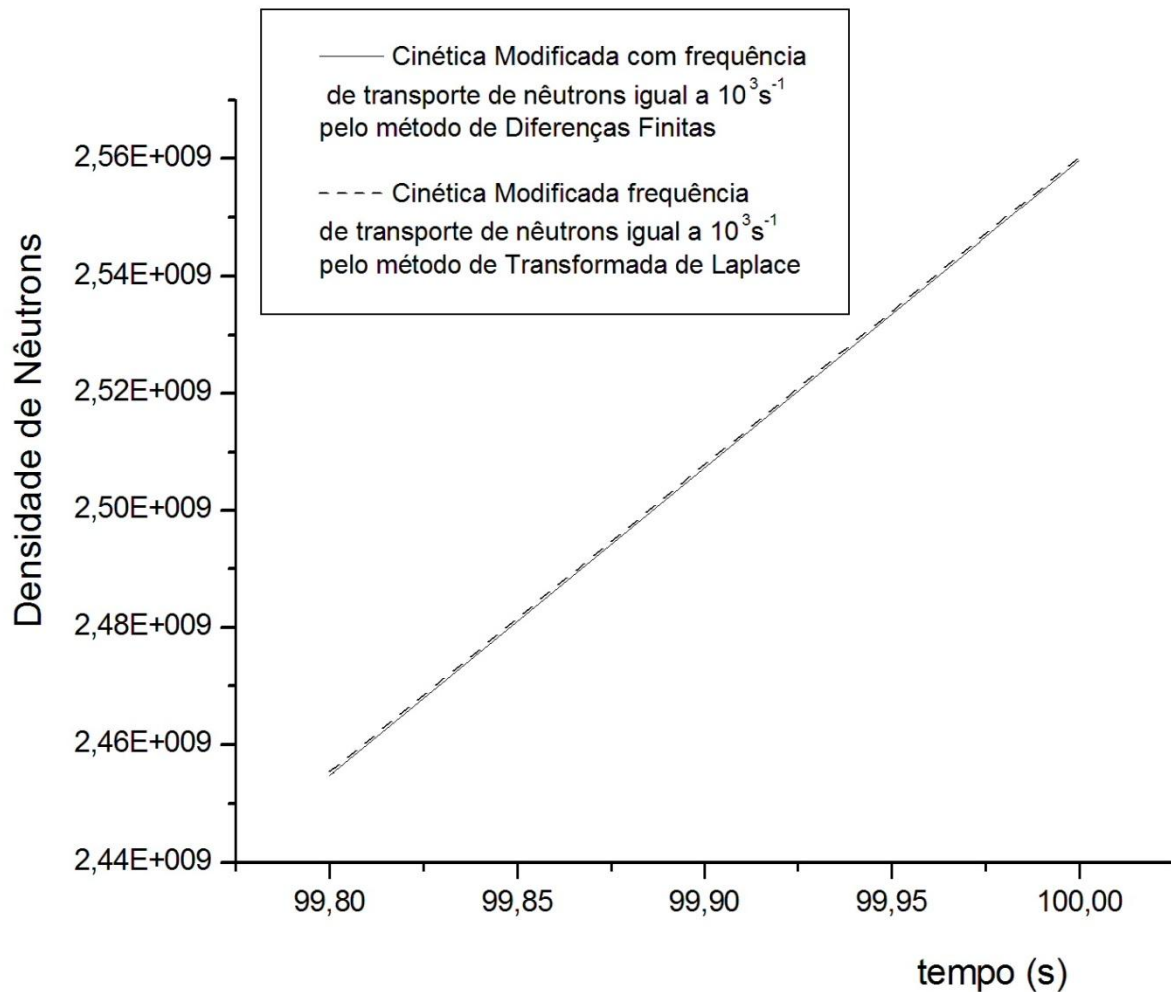


Figura 7.15: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 99,80$ s até $t = 100,00$ s para a Cinética Modificada com frequência de transporte de nêutrons igual a 10^3 s^{-1} por Diferenças Finitas e por Laplace para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.

Nos gráficos apresentados nas figuras 7.16 e 7.17 não é especificado o método adotado, quais sejam, a técnica da Transformada de Laplace e o Método de Diferenças Finitas, porque em termos de resolução gráfica os resultados são idênticos. A comparação entre os resultados das Equações da Cinética Pontual Clássica e das Equações da Cinética Pontual Modificada (com frequências de transporte de nêutrons de 10^4 s^{-1} e 10^3 s^{-1}) é feita para diferentes intervalos de tempo. No gráfico da figura 7.16 com o intervalo de 0 até 20 s e no gráfico da figura 7.17 com o intervalo de 70 s até 85 s.

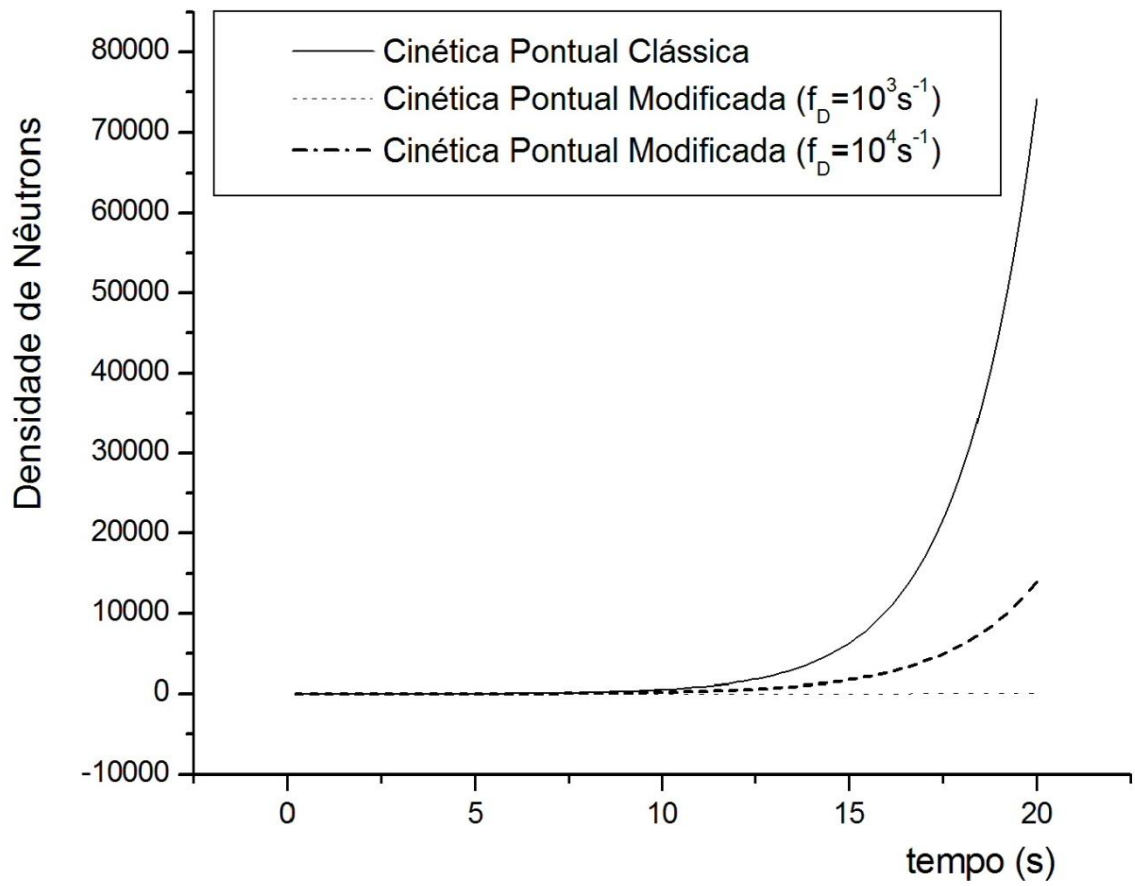


Figura 7.16: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0 \text{ s}$ até $t = 20 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.

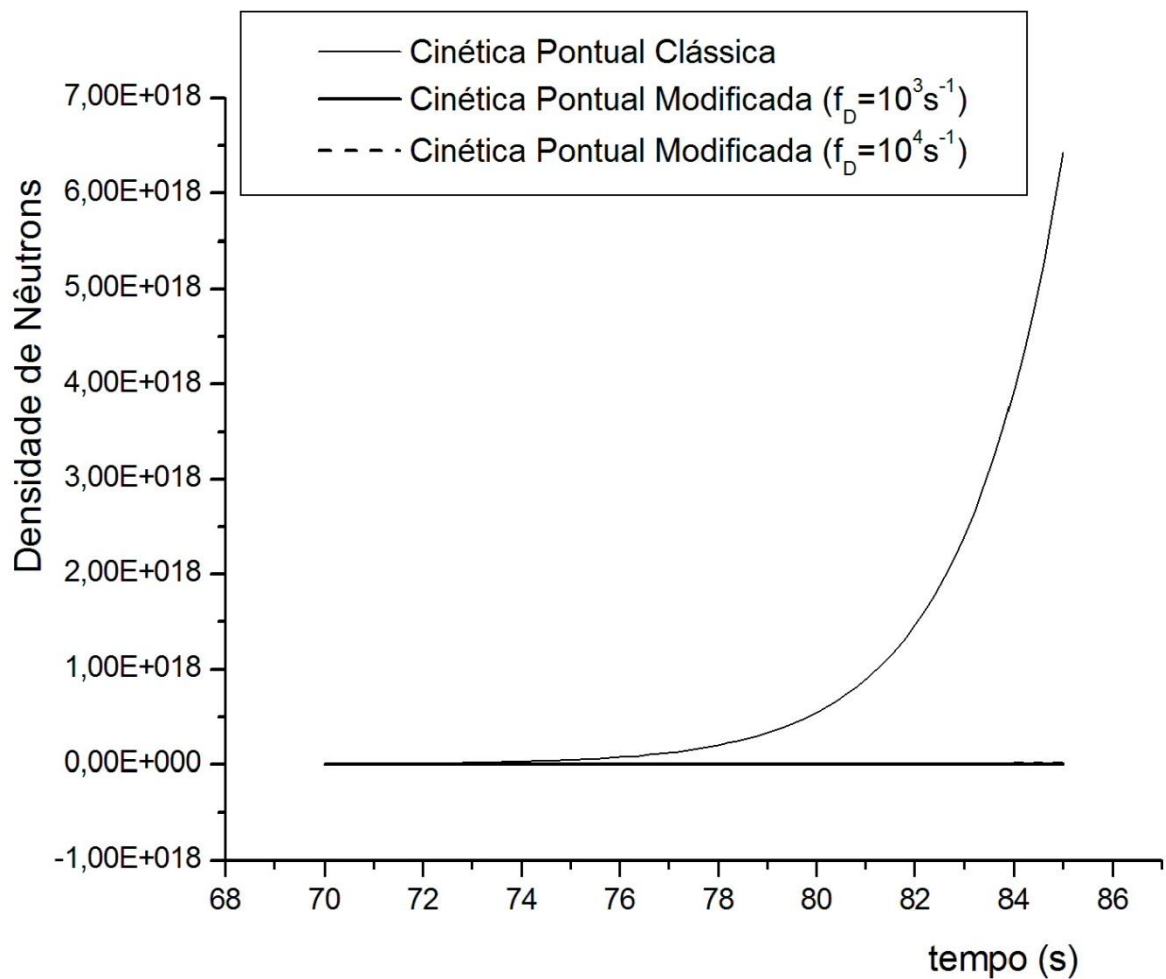


Figura 7.17: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 70$ s até $t = 85$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.

A variação da densidade de nêutrons em função da reatividade é percebida através de uma comparação entre os gráficos. Nota-se que para uma reatividade igual à fração de nêutrons retardados pelo total de nêutrons, a densidade de nêutrons obtida pelas equações da cinética pontual clássica para um tempo correspondente a 100 s é na ordem de 10^{22} , enquanto que utilizando as equações da cinética pontual modificada é na ordem de 10^9 , para uma frequência de transporte de nêutrons de 10^3 s^{-1} . Assim, a diferença entre os resultados dos modelos é mais significativa para situações de elevada reatividade.

7.2 Resultados com seis grupo de precursores

Os resultados experimentais são obtidos para os modelos da cinética pontual modificada e clássica com seis grupos de precursores. Os parâmetros cinéticos foram descritos nos capítulos 4 e 6 e seus valores apresentados nas Tabela 6.1 e 7.5. Os valores considerados para a seção de choque de absorção e o coeficiente de difusão, como também ocorreu no caso de um grupo de precursores, correspondem ao espectro médio das seções de choque de um típico núcleo de um reator PWR de acordo com DUDERSTADT & HAMILTON [2] e STACEY [12].

Tabela 7.5: Parâmetros usados nos testes com seis grupos de precursores

Parâmetro	Valor
Λ	0,00002 s
Σ_a	0,1718 cm ⁻¹
D	10 cm
v	3.10 ⁵ cm/s
β	0,007
f _A	51540 s ⁻¹

O parâmetros cinéticos adotados foram aqueles largamente adotados em diversos trabalhos acerca da Equação da Cinética Pontual Clássica com seis grupos de precursores, como por exemplo KINARD & ALLEN [7] e CHAO & ATTARD [18]. A situação analisada é mesma que foi feita para um grupo de precursores, ou seja, a inserção de um degrau constante de reatividade. Vale ressaltar que trata-se da situação mais comum e, portanto, analisada em diversos trabalhos.

Desta vez foi adotado apenas o Método de Diferenças Finitas porque foi verificado no caso do uso de um grupo de precursores que é compatível plenamente com a técnica da Transformada de Laplace. Como o cálculo por meio da Transformada de Laplace torna-se muito mais laborioso para o caso do uso de seis grupos de precursores do que o Método de Diferenças Finitas foi feita a escolha de adotar apenas o Método de Diferenças Finitas.

Em primeiro lugar é feito o cálculo com uma reatividade constante e igual a 300 pcm. Seus resultados são expressos na tabela 7.6 e nas figuras 7.18, 7.19 e 7.20. Os gráficos obtidos foram feitos com intervalos de tempo diferentes para uma melhor percepção dos resultados. Além da comparação com os resultados obtidos por meio do Método de Diferenças Finitas, onde foi usado um passo de 10^{-6} s, para as Equações da Cinética Pontual Clássica obtidos neste trabalho, também é feita a comparação dos resultados das Equações da Cinética Pontual Modificada com resultados para a Cinética Clássica obtidos por KINARD & ALLEN [7] através do Método PCA (Piecewise Constant Approximations) que pode ser traduzido como aproximação por intervalos constantes, SANCHEZ [6] pelo método de Runge-Kutta generalizado e CHAO & ATTARD [4] por meio do SCM (Stiffness Confinement Method) que pode ser traduzido como método de confinamento da rigidez na tabela 7.6.

Tabela 7.6: Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm.

Modelo e metodologia	t = 1s	t = 10s	t = 20s
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^4s^{-1} / Diferenças Finitas	2,208891	8,013279	28,26504
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^3s^{-1} / Diferenças Finitas	2,200393	7,961013	27,98072
Cinética Clássica / Diferenças Finitas	2,209842	8,019137	28,29697
Cinética Clássica / PCA	2,2098	8,0192	28,297
Cinética Clássica / Runge-Kutta	2,20985	8,01891	28,2948
Cinética Clássica / SCM	2,2254	8,0324	28,351

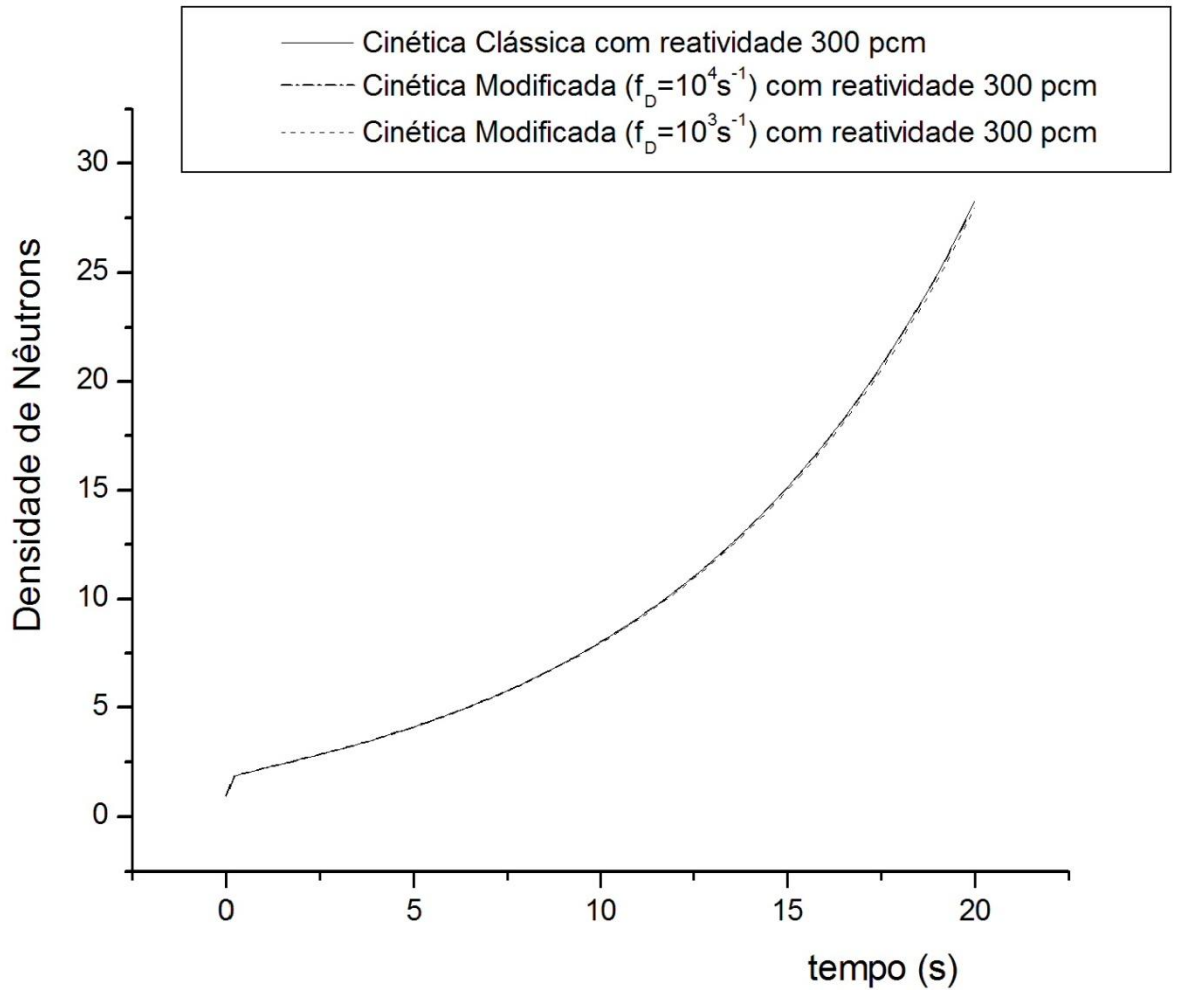


Figura 7.18: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 20$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm considerando seis grupos de precursores.

Pela análise gráfica, na ausência dos dados brutos dos diversos métodos foi feita apenas a comparação entre os resultados obtidos por meio do Método de Diferenças Finitas para as Equações da Cinética Pontual Clássica com os resultados obtidos pelo mesmo método para as Equações da Cinética Pontual Modificada, onde foram adotados dois valores para a frequência de transporte de nêutrons: 10^4 s^{-1} e 10^3 s^{-1} .

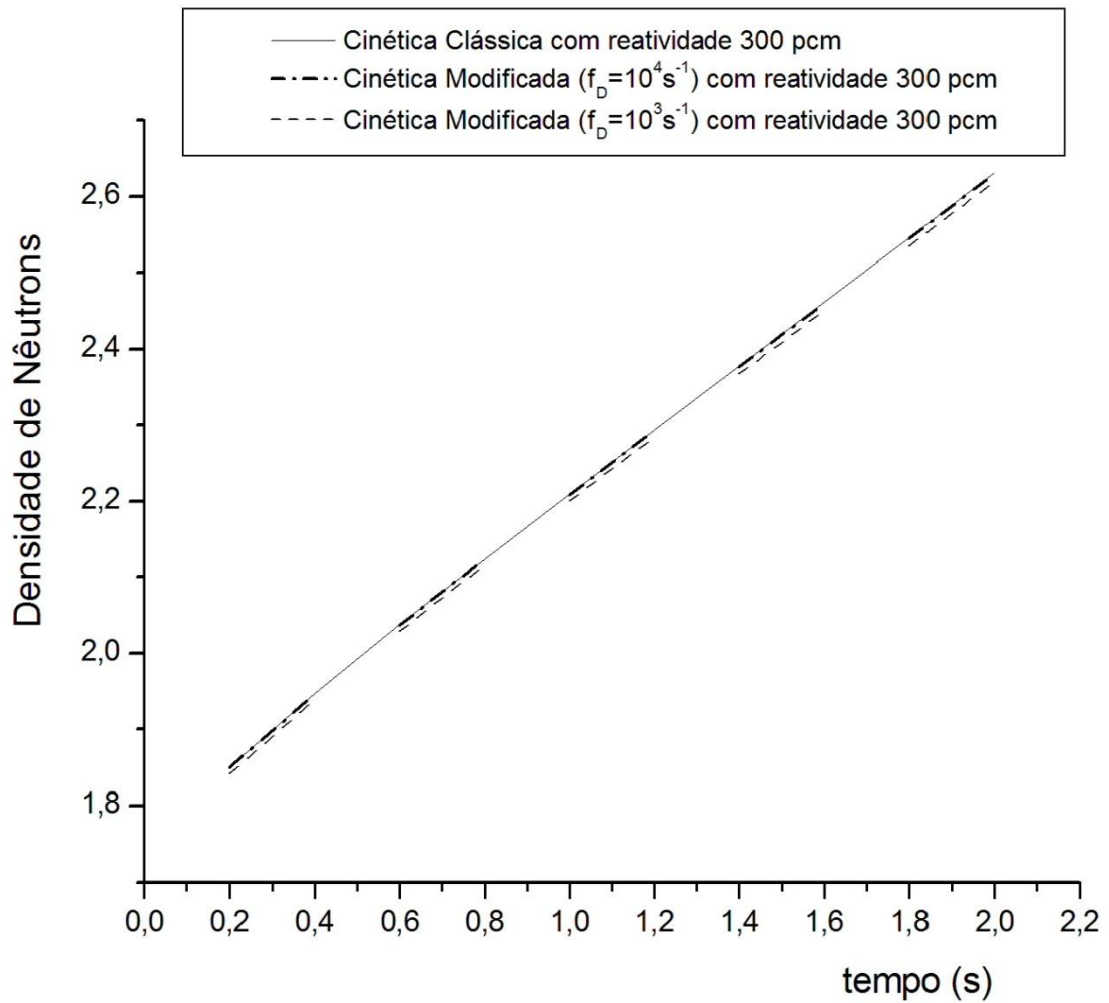


Figura 7.19: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,2 \text{ s}$ até $t = 2,0 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm considerando seis grupos de precursores.

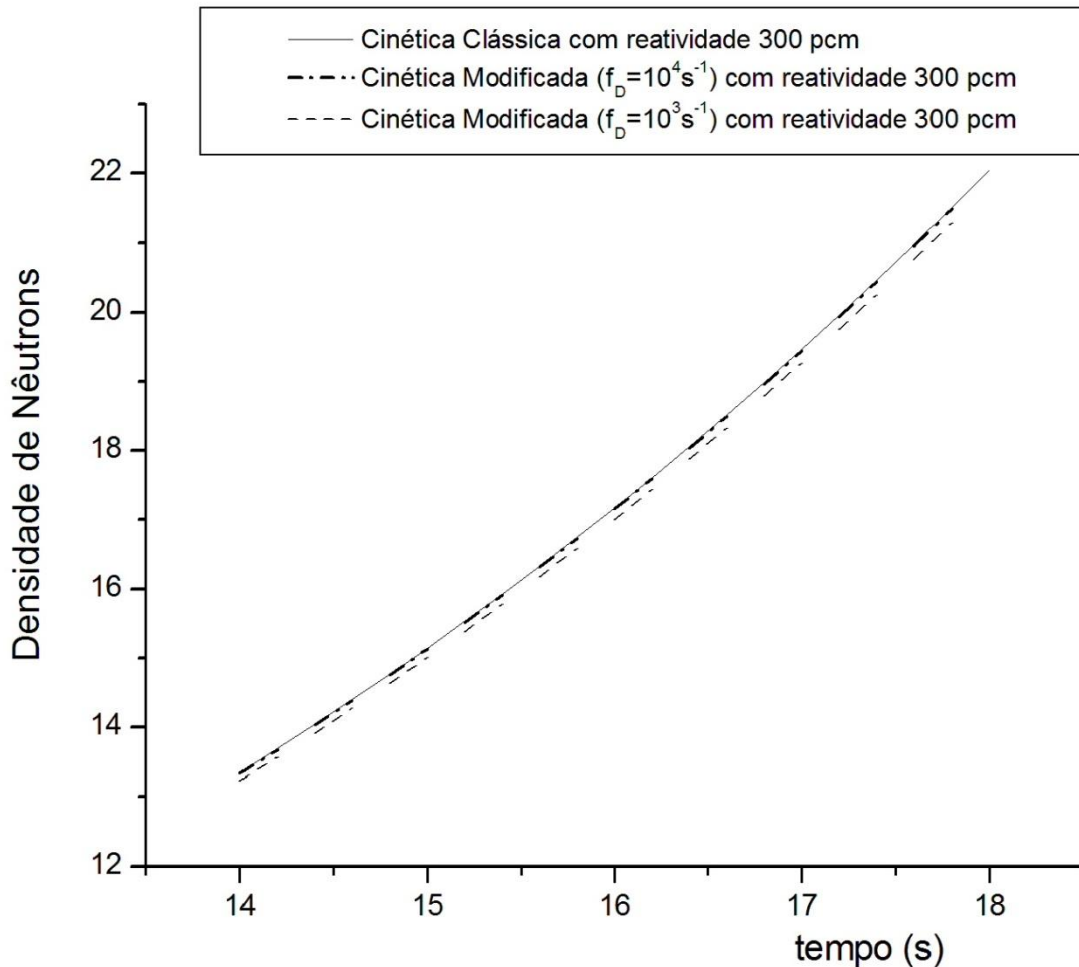


Figura 7.20: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 14\text{ s}$ até $t = 18\text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 300 pcm considerando seis grupos de precursores.

Agora é feito o cálculo com uma reatividade constante e igual a 550 pcm. Seus resultados são expressos na tabela 7.7 e nas figuras 7.21, 7.22 e 7.23. A diferença nos intervalos de tempo nos gráficos foi para melhorar a percepção dos resultados. Aqui na tabela 7.7, também é feita a comparação dos resultados das Equações da Cinética Pontual Modificada com resultados para a Cinética Clássica obtidos por KINARD & ALLEN [7] através do Método PCA (Piecewise Constant Approximations), SANCHEZ [6] pelo método de Runge-Kutta generalizado e CHAO & ATTARD [4] por meio do SCM (Stiffness Confinement Method). Nos gráficos foram feitas apenas as comparações entre os resultados obtidos por meio do Método de Diferenças Finitas para as Equações da Cinética Pontual Clássica com os resultados obtidos pelo mesmo método para as Equações da Cinética Pontual Modificada, onde foram adotados dois valores para a frequência de transporte de nêutrons: 10^4 s^{-1} e 10^3 s^{-1} . Foi usado um passo de 10^{-6} s .

Tabela 7.7: Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm.

Modelo e metodologia	t = 0,1s	t = 2s	t = 10s
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^4s^{-1} / Diferenças Finitas	5,169171	42,46188	$1,328397 \cdot 10^5$
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^3s^{-1} / Diferenças Finitas	4,677670	38,01966	91731,60
Cinética Clássica / Diferenças Finitas	5,210053	43,02072	$1,387896 \cdot 10^5$
Cinética Clássica / PCA	5,2100	43,025	$1,3886 \cdot 10^5$
Cinética Clássica / Runge-Kutta	5,21000	43,0220	$1,3880 \cdot 10^5$
Cinética Clássica / SCM	5,2057	43,024	$1,3875 \cdot 10^5$

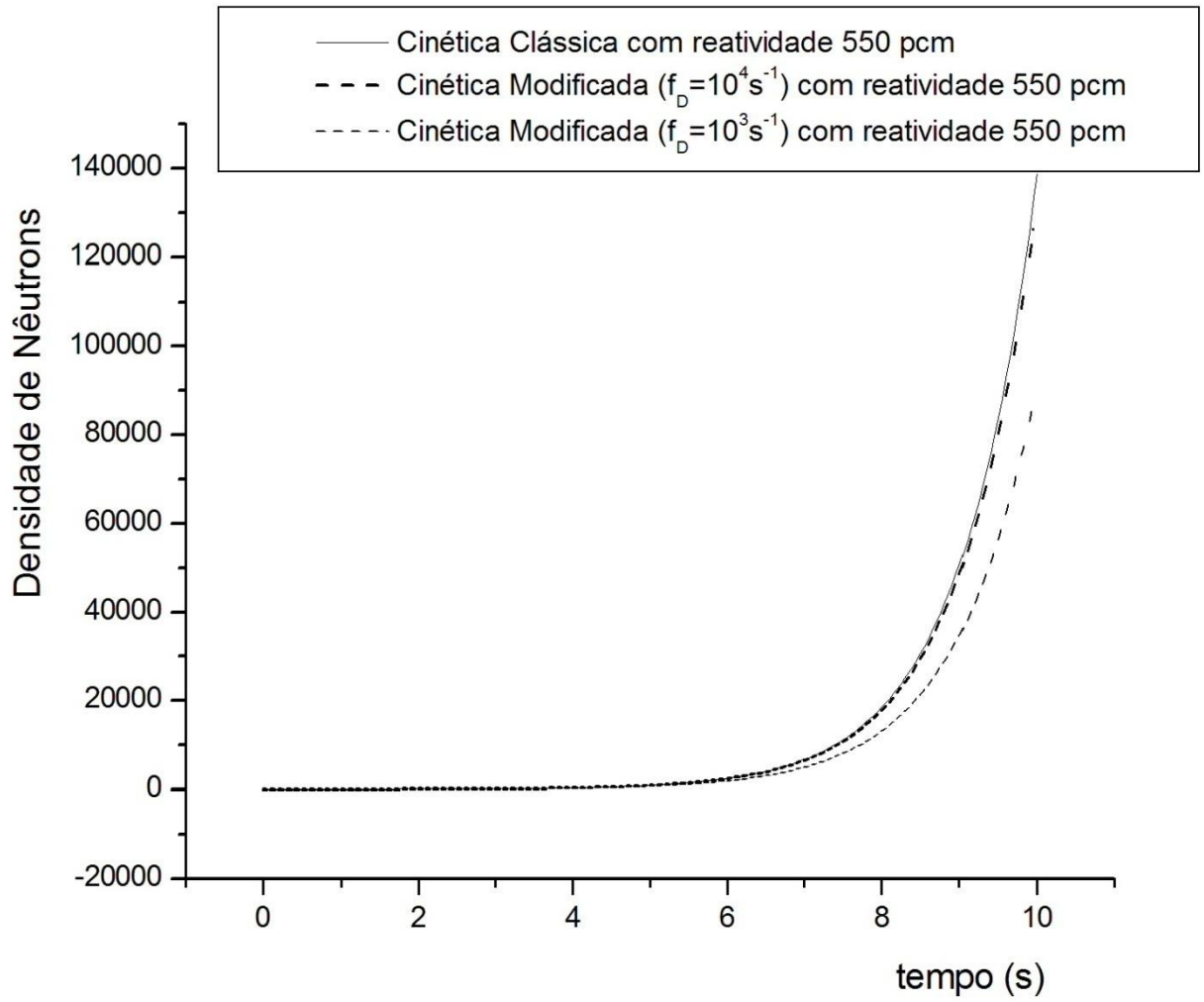


Figura 7.21: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0$ s até $t = 10$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm considerando seis grupos de precursores.

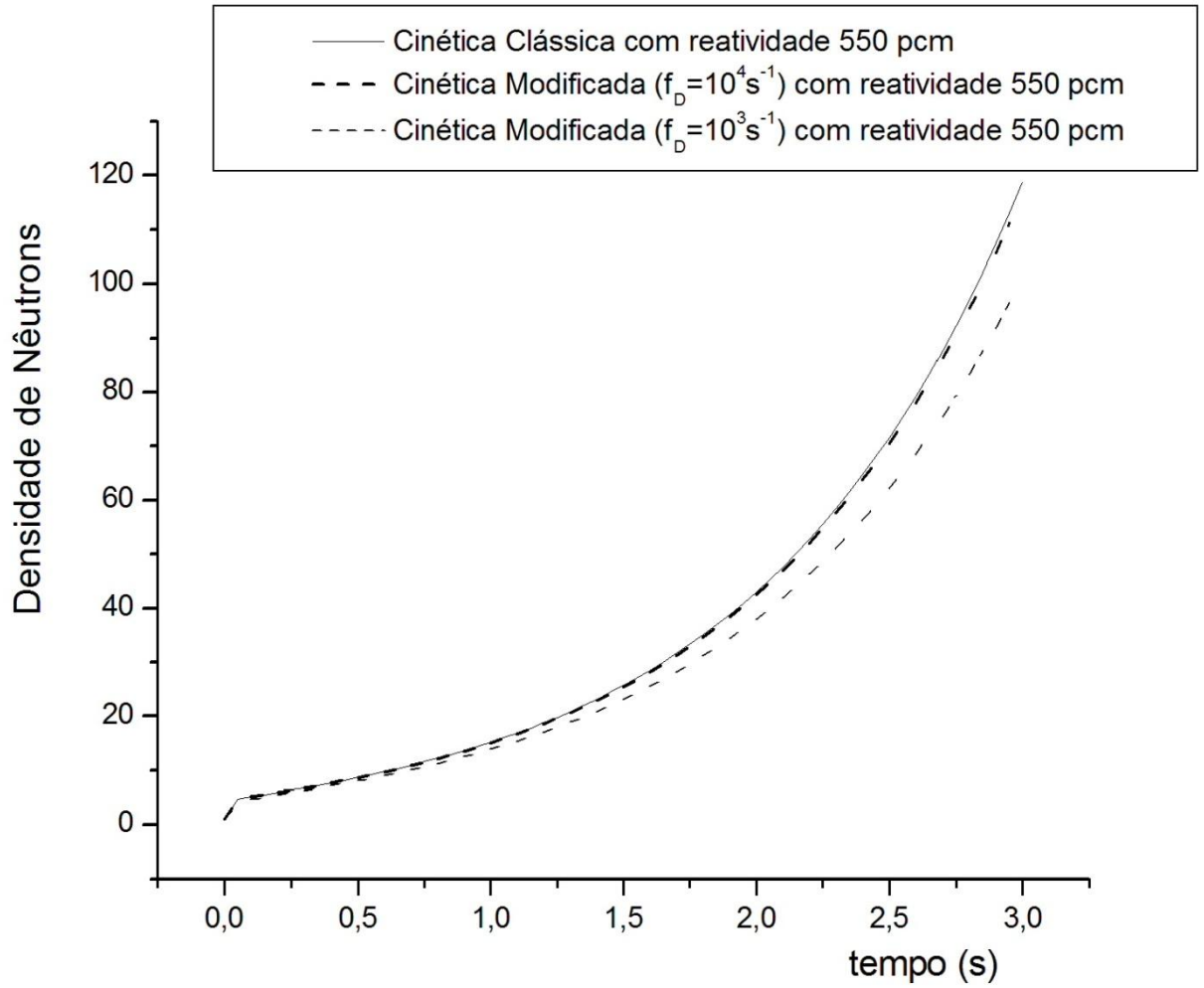


Figura 7.22: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,0 \text{ s}$ até $t = 3,0 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm considerando seis grupos de precursores.

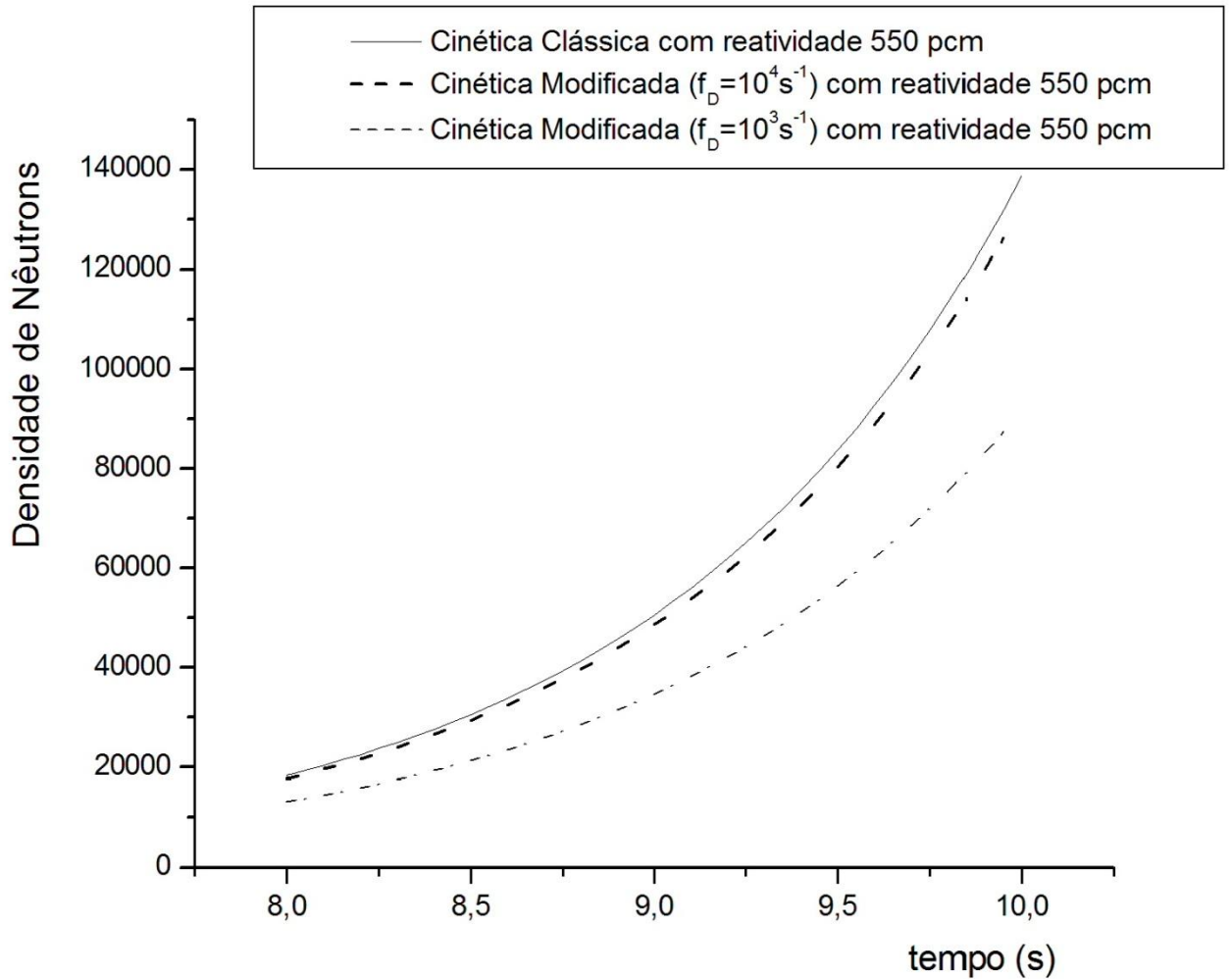


Figura 7.23: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 8,0$ s até $t = 10,0$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 550 pcm considerando seis grupos de precursores.

A seguir vem o cálculo com uma reatividade constante e igual a 700 pcm. Os resultados para este caso são expressos na tabela 7.8 e nas figuras 7.24, 7.25 e 7.26. Cada gráfico apresenta diferentes intervalos de tempo para uma melhor percepção dos resultados. Note que na tabela 7.8, também é feita a comparação dos resultados das Equações da Cinética Pontual Modificada com resultados para a Cinética Clássica obtidos por KINARD & ALLEN [7] através do Método PCA (Piecewise Constant Approximations), SANCHEZ [6] pelo método de Runge-Kutta generalizado e CHAO & ATTARD [4] por meio do SCM (Stiffness Confinement Method). Nos gráficos foram feitas apenas as comparações entre os resultados obtidos por meio do Método de Diferenças Finitas para as Equações da Cinética Pontual Clássica com os resultados obtidos pelo mesmo método para as Equações da Cinética Pontual Modificada,

onde foram adotados dois valores para a frequência de transporte de nêutrons: 10^4 s^{-1} e 10^3 s^{-1} . Foi usado um passo de 10^{-5} s .

Tabela 7.8: Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm.

Modelo e metodologia	t = 0,01 s	t = 0,5 s	t = 2 s
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^4 s^{-1} / Diferenças Finitas	3,954635	2974,806	$2,495043 \cdot 10^{10}$
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^3 s^{-1} / Diferenças Finitas	2,291743	271,8574	$5,651582 \cdot 10^6$
Cinética Clássica / Diferenças Finitas	4,508832	5344,075	$2,056366 \cdot 10^{11}$
Cinética Clássica / PCA	4,5088	5345,9	$2,0591 \cdot 10^{11}$
Cinética Clássica / Runge-Kutta	4,50885	5344,5	$2,05697 \cdot 10^{11}$
Cinética Clássica / SCM	4,5001	5353,0	$2,0627 \cdot 10^{11}$

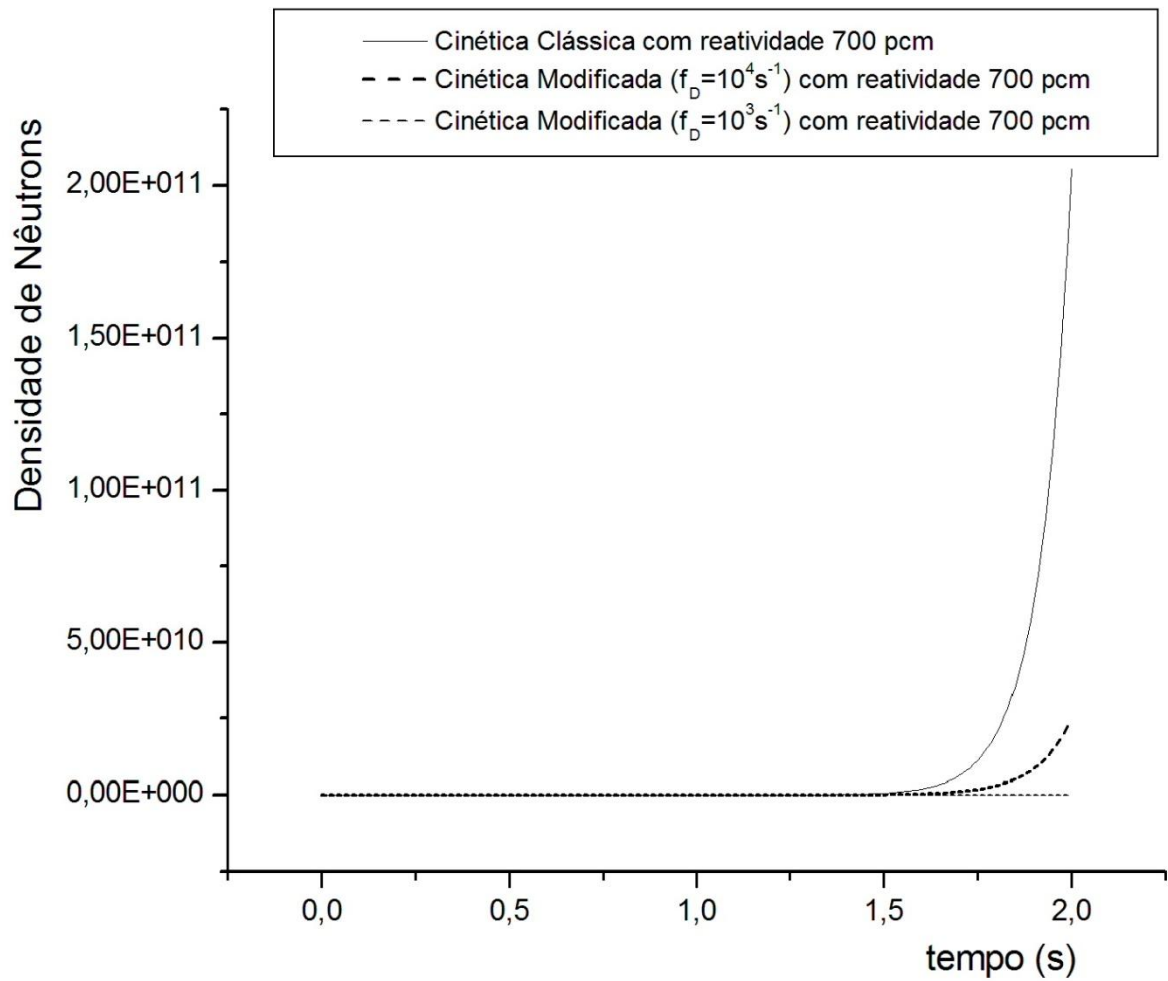


Figura 7.24: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,0 \text{ s}$ até $t = 2,0 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm considerando seis grupos de precursores.

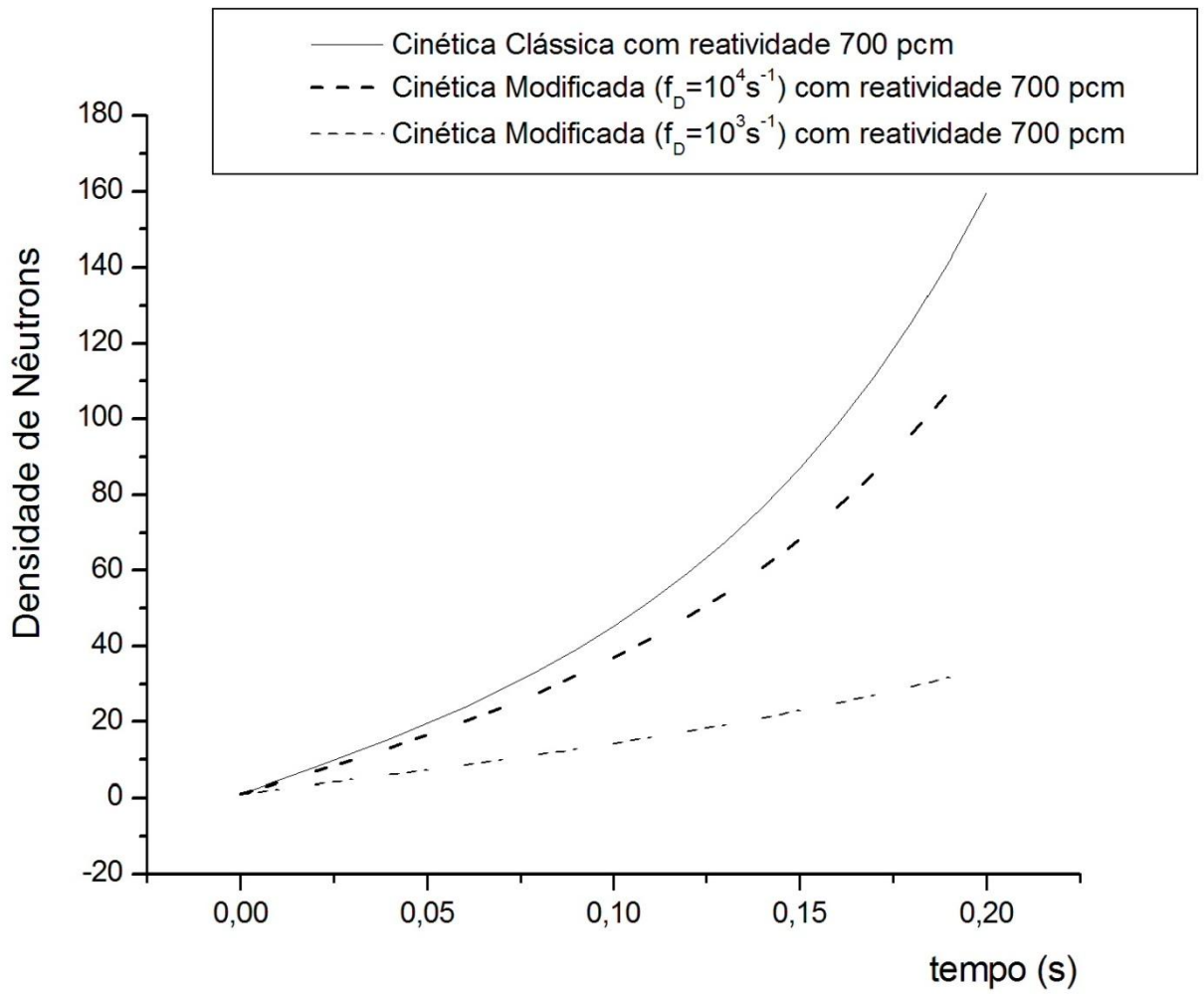


Figura 7.25: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,00 \text{ s}$ até $t = 0,20 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm considerando seis grupos de precursores.

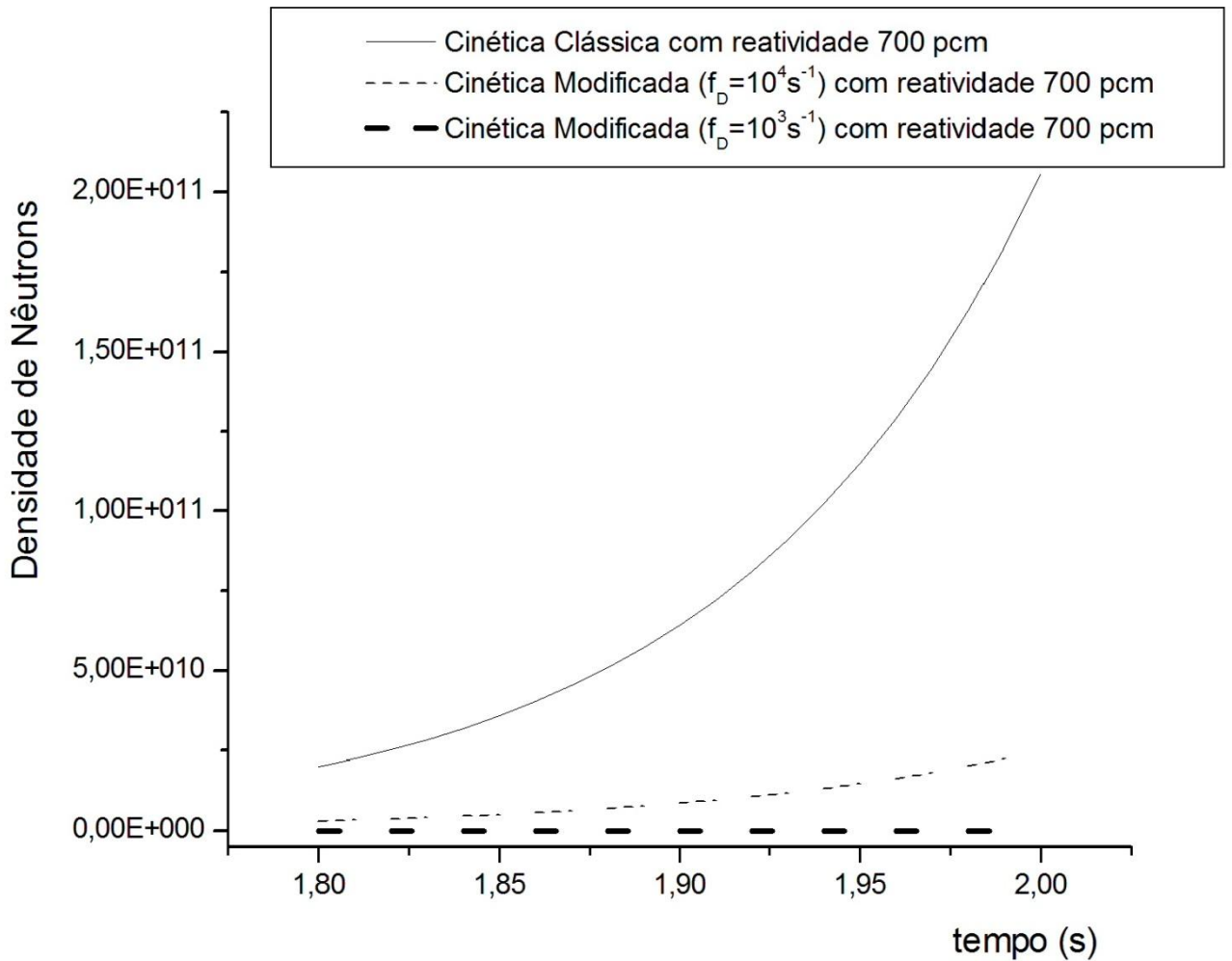


Figura 7.26: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 1,80$ s até $t = 2,00$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 700 pcm considerando seis grupos de precursores.

Por último segue o cálculo com uma reatividade constante e igual a 800 pcm. Os resultados para este caso são expressos na tabela 7.9 e nas figuras 7.27 e 7.28. Em cada gráfico são apresentados diferentes intervalos de tempo para facilitar a percepção dos resultados. Na tabela 8.9 é feita a comparação dos resultados das Equações da Cinética Pontual Modificada com resultados para a Cinética Clássica obtidos por KINARD & ALLEN [7] através do Método PCA (Piecewise Constant Approximations), SANCHEZ [6] pelo método de Runge-Kutta generalizado e CHAO & ATTARD [4] por meio do SCM (Stiffness Confinement Method). Nos gráficos foram feitas apenas as comparações entre os resultados obtidos por meio do Método de Diferenças Finitas para as Equações da Cinética Pontual Clássica com os resultados obtidos pelo mesmo método para as Equações da Cinética Pontual Modificada, onde foram adotados dois valores para a freqüência de transporte de nêutrons: 10^4 s^{-1} e 10^3 s^{-1} . Foi usado um passo de 10^{-5} s.

Tabela 7.9: Cálculo da Densidade de Nêutrons através da Cinética Pontual para seis grupos de precursores para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 800 pcm.

Modelo e metodologia	t = 0,01s	t = 0,1s	t = 1s
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^4s^{-1} / Diferenças Finitas	5,180086	611,9989	$1,761979 \cdot 10^{20}$
Cinética Modificada com frequência de transporte igual a 10^3s^{-1} / Diferenças Finitas	2,609551	41,36212	$2,279150 \cdot 10^9$
Cinética Clássica / Diferenças Finitas	6,201155	1408,451	$6,078036 \cdot 10^{23}$
Cinética Clássica / PCA	6,2029	1410,4	$6,1634 \cdot 10^{23}$
Cinética Clássica / Runge-Kutta	6,20276	1410,1	$6,1486 \cdot 10^{23}$
Cinética Clássica / SCM	6,2046	1408,9	$6,1574 \cdot 10^{23}$

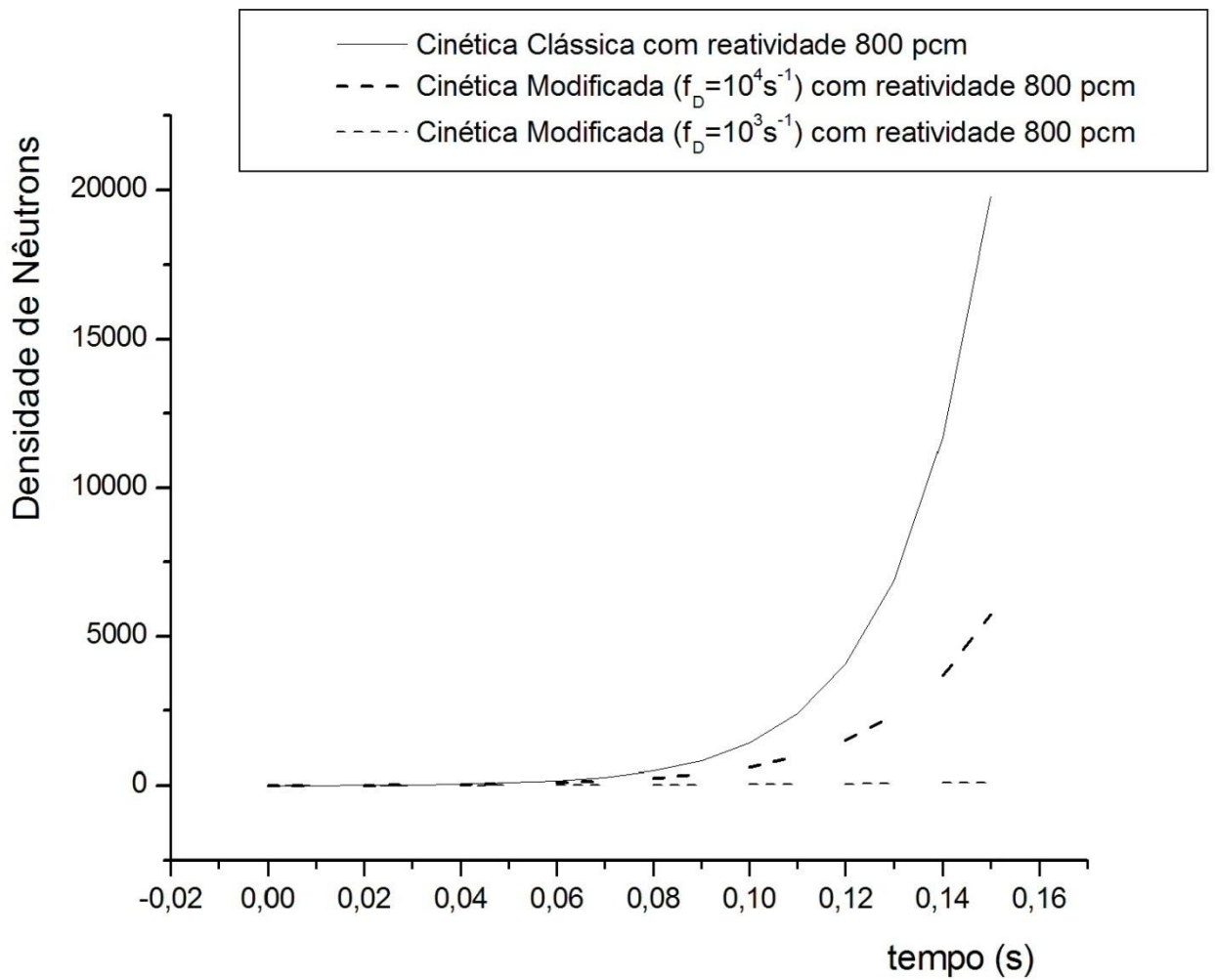


Figura 7.27: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,00$ s até $t = 0,15$ s para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 800 pcm considerando seis grupos de precursores.

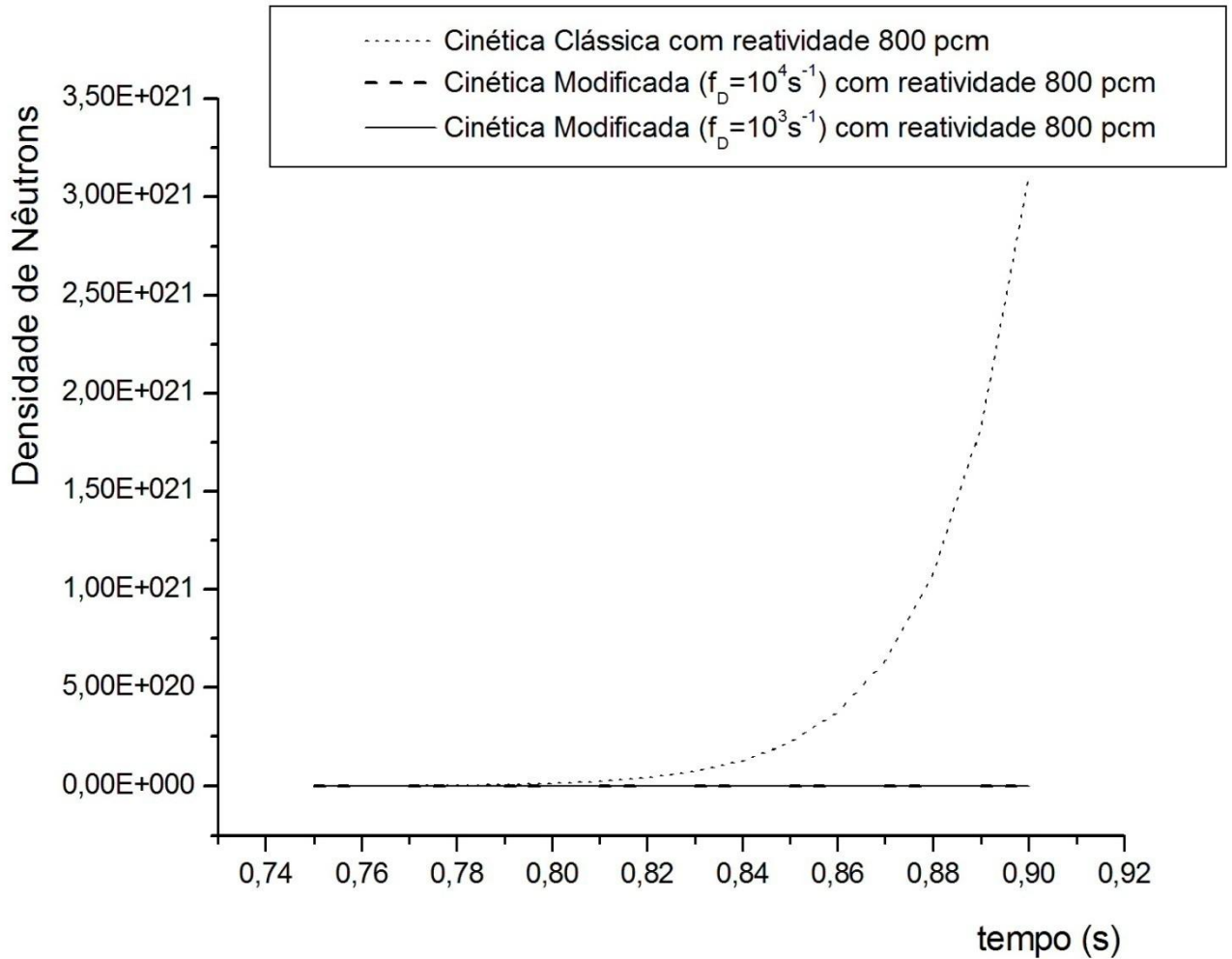


Figura 7.28: Densidade de nêutrons em função do tempo de $t = 0,75 \text{ s}$ até $t = 0,90 \text{ s}$ para a situação de inserção de um degrau de reatividade constante igual a 800 pcm considerando seis grupos de precursores.

Os resultados apresentados acima demonstram que a diferença entre a densidade de nêutrons obtida a partir das equações da cinética pontual clássica e aquela obtida a partir das equações da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons não é grande nos instantes iniciais e aumenta consideravelmente para tempos maiores.

Nota-se que o modelo da cinética pontual modificada a partir da eliminação da aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons se distancia do modelo da cinética pontual clássica em situações extremas, onde o fator de multiplicação seja bem menor que 1, ou seja, fortemente subcrítico ou então bem maior que 1, ou seja, fortemente supercrítico.

8. Considerações Finais

A relevância da cinética pontual dentro da área de Física de Reatores é reconhecida de longa data, embora existam formulações alternativas. NOWAK, DUZINKIEWICZ & PIOTROWSKI [38] é apenas um dos mais recentes artigos sobre a cinética pontual, mais especificamente sobre a chamada Cinética Pontual Fracionária. Este modelo foi introduzido por ESPINOSA-PAREDES *et. al* [14] e consiste de equações diferenciais com termos de derivadas de ordem não-inteira. Segundo OLDHAM & SPANIER [39] e METZLER & KLAFTER [40] as derivadas de ordem não-inteira são generalizações da derivada ordinária.

No contexto apresentado, o novo modelo introduzido neste trabalho, a Cinética Pontual Modificada, também apresenta uma nova formulação para a chamada Cinética Pontual Clássica e assim pode assumir um papel de relevância, por conta de adotar a aproximação referente a corrente de nêutrons.

A consistência e validade do modelo da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons pode ser verificada a partir de alguns parâmetros. No capítulo 4 foi possível analisar o modelo da cinética pontual modificada deixando de fazer uma aproximação que resulta na Lei de Fick. O uso da aproximação referente a derivada da corrente de nêutrons que resulta na cinética pontual clássica. Sem esta aproximação obtém-se a cinética pontual modificada, mas quando o valor do inverso da frequência de transporte de nêutrons ($1/f_D$) é próximo de zero, ou seja, a velocidade do nêutron é muito maior do que o seu coeficiente de difusão, os três termos adicionais na solução da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons, em relação a cinética pontual clássica, também tendem a zero. Neste caso, obtém-se a partir das Equações da Cinética Pontual Modificada, exatamente, as Equações da Cinética Pontual Clássica.

Observa-se que nos resultados obtidos, a diferença entre os modelos clássico e o modelo modificado introduzido neste trabalho é significativa. Situações onde ocorre uma variação brusca da densidade de corrente implicam que a derivada da densidade de corrente pode ser elevada, o que naturalmente resulta um desvio do modelo da cinética pontual clássica em relação aos resultados. Nesses casos, o modelo da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons tem um resultado mais próximo da realidade e o modelo clássico até poderia divergir completamente. Por isso a comparação entre os modelos

não foi feita em uma faixa de tempo estreita. É importante observar que a comparação foi feita em faixas de tempo diversas. Nos resultados foi considerado um degrau de reatividade igual a 0,001, 0,003 e 0,007 para um grupo de precursores. Foi feito também um cálculo numérico por diferenças finitas para seis grupos de precursores nas equações da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons e a inserção de um degrau de reatividade considerando essa inserção de reatividade igual a 0,003, 0,0055, 0,007 e 0,008.

A análise quantitativa e a comparação entre o modelo da cinética pontual clássica e o modelo da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons foi feita para todos os testes propostos e a relevância da aproximação é observada, o que evidentemente implica uma diferença entre os dois modelos.

A Lei de Fick é o resultado direto da aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons. Encontrar os limites de validade da Lei de Fick, em relação a aproximação considerada, torna-se fundamental e até mesmo uma consequência direta deste trabalho. Pode-se afirmar que as Equações da Cinética Pontual Modificadas são mais indicadas para situações com reatividade próxima ou acima de 700 pcm. Com reatividade abaixo de 100 pcm a diferença entre os resultados é menos significativa.

Nos resultados apresentados o cálculo pelo Método de Diferenças Finitas e o cálculo pela técnica da Transformada de Laplace resultaram em curvas sobrepostas em todos os gráficos, tanto para o modelo da cinética pontual clássica, quanto para o modelo da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons. Para a escolha de um passo adequado no método de diferenças finitas, o resultado é praticamente idêntico ao cálculo analítico, ou seja, é praticamente exato.

Nota-se que pela análise das tabelas 7.2, 7.3 e 7.4, bem como a partir dos gráficos expressos nas figuras 7.1 até 7.3, na figuras 7.7 até 7.9 e nas figuras 7.13 até 7.15, que a diferença entre o modelo da cinética pontual clássica e o modelo proposto da cinética pontual modificada, ou seja, sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons é maior que a diferença entre o cálculo numérico (pelo Método de Diferenças Finitas) e o cálculo analítico (pela técnica da Transformada de Laplace) dentro de cada um dos modelos, ou seja, os resultados confirmam que a diferença entre os modelos, embora pequena, é maior que a diferença dentro de cada modelo entre o cálculo numérico e o analítico.

Uma vez que o Método de Diferenças Finitas e a técnica de Transformada de Laplace determinaram resultados quase idênticos, no caso da Cinética Pontual com seis grupos de precursores inserindo um degrau de reatividade constante pode ser feito apenas por meio do Método de Diferenças Finitas. A diferença entre os resultados dos modelos da Cinética Pontual

Clássica e a Cinética Pontual Modificada torna-se ainda maior com o uso de seis grupos de precursores e aumenta ainda mais com os valores mais altos de reatividade. Os resultados demonstram que para situações severas as Equações da Cinética Pontual Modificada apresentam resultados diferentes do modelo clássico.

A obtenção das Equações da Cinética Pontual Modificada foi feita, como está demonstrado nos capítulos 2 e 3, sem o uso da aproximação que considera a derivada da corrente de nêutrons desprezível e resulta na chamada Lei de Fick. Considerando os efeitos desta derivada da corrente de nêutrons pode-se inferir que as Equações da Cinética Pontual Modificada possa ser um modelo mais condizente com os resultados experimentais.

A diferença torna-se significativa para situações mais severas com reatividades bem maiores do que aquelas que surgem nas condições usuais de operação de um reator nuclear. Assim, o modelo clássico tem dado conta das situações observadas até o presente momento. Os resultados deste trabalho sugerem que o modelo da Cinética Pontual Modificada pode vir a representar um avanço em termos de melhoria nas situações extremamente severas.

A Cinética Pontual Inversa é a aplicação imediata do modelo proposto. O controle de um reator nuclear poderá ser feito de forma mais precisa, sem comprometer a rapidez do processo. Torna-se evidente a viabilidade de inverter o problema, calculando a reatividade que vai determinar o comportamento passado da densidade de nêutrons que se expressa a partir de uma relação direta com a potência nuclear. Assim sendo, o procedimento está mais condizente com a metodologia de controle do reator nuclear.

Outros casos que complementam o estudo feito nesta tese podem ser analisados em trabalhos futuros, quais sejam:

- 1) Inserção de um degrau de reatividade negativo e/ou nulo para a equação da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons com um grupo de precursores.

- 2) Inserção de uma reatividade do tipo rampa para a equação da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons com um grupo de precursores.

- 3) Inserção de uma reatividade senoidal para a equação da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons com um grupo de precursores.

- 4) Revalidação das Equações da Cinética Pontual Modificada através da Equação de Transporte de Nêutrons.

5) Cálculo analítico ou semi-analítico para seis grupos de precursores nas equações da cinética pontual sem a aproximação para a derivada do logaritmo da corrente de nêutrons e a inserção de um degrau de reatividade.

A Cinética Pontual Modificada é um modelo promissor, onde existem muitas alternativas de análise e aplicação. Por outro lado, os resultados deste trabalho são satisfatórios, permitindo um novo campo de estudos a ser explorado.

9. Referências Bibliográficas

- [1] CHAVES, Alaor & SHELLARD, Ronald Cintra, **Física para o Brasil, Pensando o Futuro**. São Paulo, Sociedade Brasileira de Física, 2005.
- [2] DUDERSTADT, James J. & HAMILTON, L. J., **Nuclear Reactor Analysis**. New York, John Wiley & Sons, 1987.
- [3] HENRY, Allan F., **Nuclear Reactor Analysis**. Cambridge, Massachusetts and London, The MIT Press, 1975.
- [4] CHAO, Yung-An & ATTARD, Anthony, “A Resolution of the Stiffness Problem of Reactor Kinetics”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 90, pp. 40-46, 1985.
- [5] NUNES, Anderson Lupo, 2006, *Aperfeiçoamento do Método de Confinamento da Rgidez para a Solução das Equações da Cinética Pontual*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- [6] SÁNCHEZ, J. “On the Numerical Solution of the Point Reactor Kinetics by Generalized Runge-Kutta Methods”. **Nuclear Science and Engineering**, vol. 103, pp. 94-99, 1989.
- [7] KINARD, Matthew & ALLEN, E. J., “Efficient numerical solution of the point kinetics equations in nuclear reactor dynamics”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 31, pp. 1039-1051, 2003.
- [8] PALMA, Daniel A. P., MARTINEZ, Aquilino S. & GONÇALVES, Alessandro C., “Analytical solution of point kinetics equations for linear reactivity variation during the start-up of a nuclear reactor”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp. 1469-1471, 2009.
- [9] REBELLO JR., André Luiz P., MARTINEZ, Aquilino S. & GONÇALVES, Alessandro C., “Analytical solution of modified point kinetics equations for linear reactivity variation in subcritical nuclear reactors adopting an incomplete gamma function approximation”, **Natural Science**, vol.4, pp. 919-923, 2012.
- [10] GANDINI, A. & SALVATORES, M., “The physics of subcritical multiplying systems”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol.6, pp.673-686, 2002.
- [11] LEITE, Sérgio Q. B., PALMA, Daniel A. P., VILHENA, Marco Tullio de & BODMANN, Bardo E. J., “Analytical representation of the solution of the point reactor kinetics equations with adaptive time step”, **Progress in Nuclear Energy**, vol 70, pp. 112-118, 2014.

- [12] GONÇALVES, Wererson de C., MARTINEZ, Aquilino S. & DA SILVA, Fernando C., “Point kinetics equations for subcritical systems based on the importance function associated to an external neutron source” **Annals of Nuclear Energy**, vol. 79, pp. 1-8, 2015.
- [13] ZHANG, F., CHEN, W. Z. & GUI, X. W., “Analytic method study of point-reactor kinetic equation when cold start-up”. **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35, 746–749, 2008.
- [14] ESPINOSA-PAREDES, Gilberto, POLO-LABARRIOS, Marco A., ESPINOSA-MARTINEZ, Erick G., VALLE-GALLEGOS, Edmundo del. “Fractional neutron point kinetics equations for nuclear reactor dynamics”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 38, pp. 307-330, 2011.
- [15] EDWARDS, John T., FORD, Neville J. & SIMPSON, A. Charles, “The numerical solution of linear multi-term fractional differential equations: systems of equations”, **Journal of Computational and Applied Mathematics**, vol.148 pp. 401–418, 2002.
- [16] ESPINOSA-PAREDES, Gilberto, MORALES-SANDOVAL, Jaime B., VÁSQUEZ-RODRÍGUEZ, Rodolfo, “Constitutive laws for the neutron density current”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35, pp. 1963-1967, 2008.
- [17] SAHA RAY, S. & PATRA, A., “An Explicit Finite Difference scheme for numerical solution of fractional neutron point kinetic equation”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 41, pp. 61-66, 2012.
- [18] QUINTERO-LEYVA, Barbaro, “Numerical solution of the integro-differential equation of the point kinetics of nuclear reactors as an ODE”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 78, pp. 160-165, 2015.
- [19] PALMA, Daniel A. P., DA SILVA, Adilson C., GONÇALVES, Alessandro C. & MARTINEZ, Aquilino S., “An Alternative Technique for the Implementation of an Analytical Approximation for Transients with Temperature Feedback”, In: *International Nuclear Atlantic Conference*, Rio de Janeiro, Set. 2009.
- [20] DE CARVALHO, Eduardo Camões D., 2003, *Simulador Digital de Princípios Básicos de uma Planta Nuclear PWR*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- [21] GONÇALVES, Alessandro da Cruz, 2006, *Monitoração da Reatividade através do Histórico da Potência Nuclear*, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- [22] SUESCÚN, Daniel, MARTINEZ, Aquilino S. & DA SILVA, Fernando C. “Calculation of reactivity using a finite impulse response filter”. **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35, pp. 472-477, 2008.
- [23] ANTOLIN, M. Q., MARTINEZ, Aquilino S., DA SILVA, Fernando C. & PALMA, Daniel A. P., “Calculation of reactivity in subcritical reactors using the method of partial derivatives”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 60, pp. 34-38, 2013.

- [24] HETRICK, David L., **Dynamics of Nuclear Reactor**. 1^a edição. Chicago e Londres, The University of Chicago Press Ltda. 1971.
- [25] AKCASU, Ziya, LELLOUCHE, Gerald & SHOTKIN, Louis M., **Mathematical Methods in Nuclear Reactor Dynamics**. New York and London, Academic Press, 1971.
- [26] JAHANBIN, Ali & MALMIR, Hessian, “Kinetic parameters evaluation of PWRs using static cell and core calculation codes”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 41, pp. 110-114, 2012.
- [27] STACEY, Weston M., **Nuclear Reactor Analysis**. 2^a edição. Weinheim, Germany, Wiley-VCH GmbH & CO KGaA, 2007.
- [28] BUTKOV, Eugene, Trad. CARVALHO, João Bosco P. F. de. **Física Matemática**. LTC S.A. Rio de Janeiro, 1988.
- [29] DYKE, Philip P. G. **An Introduction to Laplace Transforms and Fourier Series**. Spring Verlag London, 2001.
- [30] SCHIFF, Joel. L. **The Laplace Transform: Theory and Applications**. Spring Verlag New York, 1999.
- [31] GARBI, Gilberto Geraldo. **O Romance das Equações Algébricas**. São Paulo, SP. Makron Books. 1997.
- [32] ALVIM, Antonio C. M., **Métodos Numéricos em Engenharia Nuclear**. Curitiba, PR. Editora Certa, 2007.
- [33] LE VEQUE, Randall J., **Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations: Steady-State and Time-Dependent Problems**. SIAM printed. Seattle, 2007.
- [34] BOOLE, George. **Calculus of Finite Differences**. Chelsea Publishing Company 4th Edition, New York, 1957.
- [35] JORDAN, Charles. **The Calculus of Finite Differences**. Chelsea Publishing Company, 3rd Edition, New York, 1965.
- [36] BRADY, M. C., ENGLAND, T. R. and RIDER, B. F. “Fission-product chain yields and delayed neutrons”, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 103, pp. 129, 1989.
- [37] MILOSEVIC, M., PESIC, M., AVDIC, S. and NIKOLIC, D. “A comparative study of effective delayed neutron fraction”. **Annals of Nuclear Energy**, Vol. 22, No. 6, pp. 389-394, 1995.
- [38] NOWAK, Tomasz K., DUZINKIEWICZ, Kazimierz & PIOTROWSKI, Robert. “Numerical Solution of Fractional Neutron Point Kinetics Model in Nuclear Reactor”. **Archives of Control Sciences**, Vol. 24, pp 129-154, 2014.

[39] OLDHAM, Keith B. & SPANIER, Jerome. **The Fractional Calculus**. Academic Press, California, 1974.

[40] METZLER, R. and KLAFTER, J. "Boundary value problems for fractional diffusion equations", **Physica A**, vol. 278, 107-125, 2000.