



MODELO DE CINÉTICA INVERSA PARA O CÁLCULO DA REATIVIDADE DE REATORES A SAL FUNDIDO

Rodrigo Costa Diniz

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: Alessandro da Cruz Gonçalves
Felipe S. de Souza da Rosa

Rio de Janeiro
Março de 2022

MODELO DE CINÉTICA INVERSA PARA O CÁLCULO DA REATIVIDADE
DE REATORES A SAL FUNDIDO

Rodrigo Costa Diniz

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. Alessandro da Cruz Gonçalves, D.Sc.

Prof. Felipe Siqueira de Souza da Rosa, D.Sc.

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

Prof. Zelmo Rodrigues de Lima, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2022

Diniz, Rodrigo Costa

MODELO DE CINÉTICA INVERSA PARA O
CÁLCULO DA REATIVIDADE DE REATORES A SAL
FUNDIDO/Rodrigo Costa Diniz. – Rio de Janeiro:
UFRJ/COPPE, 2022.

XVIII, 121 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves

Felipe S. de Souza da Rosa

Tese (doutorado) – UFRJ/COPPE/Programa de
Engenharia Nuclear, 2022.

Referências Bibliográficas: p. 104 – 109.

1. Física de Reatores.
 2. Cinética Inversa.
 3. Combustível Circulante.
 4. Reator a Sal Fundido.
- I. Gonçalves, Alessandro da Cruz *et al.*
II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE,
Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

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

MODELO DE CINÉTICA INVERSA PARA O CÁLCULO DA REATIVIDADE DE REATORES A SAL FUNDIDO

Rodrigo Costa Diniz

Março/2022

Orientadores: Alessandro da Cruz Gonçalves
Felipe S. de Souza da Rosa

Programa: Engenharia Nuclear

Em grande parte dos designs de reatores a sal fundido seu combustível é líquido e, misturado com o refrigerante composto de sais fundidos, circula pelo reator. Essa circulação introduz importantes fenômenos no estudo da física de reatores, necessitando, assim, de mudanças nos modelos físicos já existentes aplicados em reatores convencionais com combustível sólido. Uma das principais influências do escoamento do combustível no reator é na concentração de precursores de nêutrons atrasados, que passam a decair parcialmente fora do núcleo, não contribuindo para a reação em cadeia de fissão. Nesta tese são estudados os modelos físicos usados para esse tipo de reator, em especial o da cinética pontual de nêutrons, a fim de se desenvolver um modelo de cinética pontual inversa, que possui aplicações práticas como monitoração da reatividade do núcleo e calibração de barras de controle. O modelo de cinética inversa proposto admite soluções analíticas, semi-analíticas e numéricas. Após verificar o modelo desenvolvido por meio de testes de consistência, que demonstram uma concordância satisfatória entre este modelo e o de cinética pontual, são propostas duas aplicações em transientes: uma variação linear entre níveis de potência, e a determinação das regiões de criticalidade do reator durante uma queda de velocidade de escoamento. Os resultados obtidos mostram que a cinética inversa

é capaz de determinar com precisão a reatividade tanto para a execução de variação da potência, no primeiro cenário, quanto para manter o reator subcrítico em caso de acidentes, no segundo cenário.

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

INVERSE KINETICS MODEL FOR CALCULATION OF REACTIVITY IN
MOLTEN SALT REACTORS

Rodrigo Costa Diniz

March/2022

Advisors: Alessandro da Cruz Gonçalves

Felipe S. de Souza da Rosa

Department: Nuclear Engineering

Most molten salt reactor designs present a liquid fuel that, mixed with the coolant composed of molten salts, circulates through the reactor. This circulation introduces important phenomena in the study of reactor physics, thus requiring changes in the existing physical models applied in conventional reactors with solid fuel. One of the main influences of the fuel flow in the reactor is in the delayed neutron precursors' concentration, which partially decay outside the core, not contributing to the fission chain reaction. In this thesis, we investigate the physical models used for this type of reactor, especially the neutron point kinetics, in order to develop an inverse point kinetics model, which has practical applications such as core reactivity monitoring and control rod calibration. The proposed inverse kinetics model has analytical, semi-analytical and numerical solutions. After verifying the developed model through consistency tests, which demonstrate a satisfactory agreement between this model and the point kinetics one, two applications in transients are proposed: a linear variation between power levels, and the determination of criticality regions of the reactor during a decrease in flow velocity. The results obtained show that the inverse kinetics is capable of accurately determine the reactivity both for the execution of power variation, in the first scenario, and to maintain the reactor subcriticality in case of accidents, in the second scenario.

Sumário

Lista de Figuras	x
Lista de Tabelas	xii
Lista de Símbolos	xiii
Lista de Abreviaturas	xviii
1 Introdução	1
1.1 Energia nuclear na atualidade	1
1.2 Reator a sal fundido	2
1.3 Cinética pontual de nêutrons e cinética inversa	4
1.4 Objetivos	5
1.5 Organização do texto	5
2 Modelagem Matemática de um Reator a Sal Fundido	8
2.1 Equações do MSR	9
2.2 Cálculo do tempo de trânsito	12
2.2.1 Variação Instantânea	13
2.2.2 Variação Linear	15
2.2.3 Variação Exponencial	22
2.2.4 Método Numérico Para Variação Genérica da Velocidade de Escoamento	27
3 Solução do Sistema Estacionário e Aproximações	32
3.1 Solução semi-analítica para um caso simples	32
3.2 Casos limites do sistema estacionário	35

3.2.1	Aproximação de Velocidade Infinita	35
3.2.2	Aproximação de Não-Recirculação dos Precursores	39
3.3	Influência da velocidade de escoamento no sistema	43
4	Equações da Cinética Pontual com Atualização dos Precursores	47
4.1	Dedução das equações da cinética pontual	47
4.2	Relação entre os parâmetros cinéticos de combustível líquido e os de combustível sólido	53
5	Modelo de Cinética Inversa	56
5.1	Solução semi-analítica	58
5.2	Aproximação de parâmetros cinéticos e de tempo de trânsito constantes	59
6	Soluções Numéricas	65
6.1	Equações do sistema estacionário e das variáveis adjuntas	65
6.2	Equações da cinética espacial	70
6.2.1	Semi-discretização da Variável Espacial	70
6.2.2	Integração Numérica no Tempo	74
6.3	Equações da cinética pontual	75
6.3.1	Cálculo dos Fatores de Amplitude	75
6.3.2	Atualização da Forma Espacial dos Precursores e dos Parâmetros Cinéticos	76
6.4	Equações da cinética inversa	79
6.4.1	Aproximação de parâmetros constantes	79
6.4.2	Caso geral: solução por diferenças finitas	82
6.4.3	Caso geral: solução semi-analítica	83
7	Resultados	85
7.1	Testes para as equações da cinética inversa	85
7.1.1	Teste 1: reatividade inicial constante	87
7.1.2	Teste 2: variação do fator de amplitude do fluxo	89
7.2	Aplicações da cinética inversa	91
7.2.1	Variação linear entre níveis de potência	92

7.2.2	Regiões de criticalidade durante queda da velocidade de escoamento	96
8	Conclusões	102
	Referências Bibliográficas	104
A	Função W de Lambert	110
A.1	Equações do cálculo do tempo de trânsito	113
A.2	Equação diferencial ordinária não-linear	115
A.3	Equação diferencial atrasada (EDA)	116

Lista de Figuras

1.1	Exemplo esquemático de um reator a sal fundido.	3
2.1	Representação unidimensional de um reator com combustível líquido.	8
2.2	Variação instantânea da velocidade.	13
2.3	Situação onde o precursor percorre parte da tubulação com velocidade u_0 e parte com u_f	14
2.4	Variação do tempo de trânsito para variação instantânea da velocidade.	15
2.5	Variação linear da velocidade.	16
2.6	Situação onde o precursor percorre parte da tubulação com velocidade constante u_0 e parte acelerando com α	17
2.7	Situação onde o precursor: a) percorre parte da tubulação com velocidade constante, parte acelerando, e o restante com velocidade u_f ; b) percorre toda a tubulação acelerando.	18
2.8	Situação onde o precursor percorre parte da tubulação acelerando e parte com velocidade constante.	19
2.9	Variação do tempo de trânsito para variação linear da velocidade.	22
2.10	Variação exponencial da velocidade.	23
2.11	Situação onde o precursor percorre parte da tubulação com velocidade constante u_0 e parte com velocidade variando exponencialmente.	24
2.12	Situação onde o precursor percorre toda a tubulação com velocidade variando exponencialmente.	24
2.13	Variação do tempo de trânsito para variação exponencial da velocidade.	26
2.14	Variação do tempo de trânsito para variações instantânea, linear e exponencial da velocidade. (1)	26

2.15	Variação do tempo de trânsito para variações instantânea, linear e exponencial da velocidade. (2)	27
3.1	Distribuição axial do fluxo de nêutrons para diferentes valores da velocidade de escoamento em cm/s.	44
3.2	Distribuição axial da concentração de precursores para diferentes valores da velocidade de escoamento em cm/s.	44
3.3	Reatividade, ρ , em função da velocidade de escoamento, u , em escala logarítmica para a velocidade.	45
6.1	Fluxograma do algoritmo numérico.	79
7.1	Esquema do primeiro teste.	86
7.2	Esquema do segundo teste.	86
7.3	Variação temporal da reatividade e da potência relativa. (1)	93
7.4	Variação temporal da reatividade e da potência relativa. (2)	94
7.5	Variação temporal da reatividade e da potência relativa. (3)	95
7.6	Curva de criticalidade e regiões de sub e supercriticalidade durante a queda da velocidade de escoamento. (1)	97
7.7	Curva de criticalidade e regiões de sub e supercriticalidade durante a queda da velocidade de escoamento. (2)	98
7.8	Curva de criticalidade e regiões de sub e supercriticalidade durante a queda da velocidade de escoamento. (3)	99
7.9	Variação da reatividade do sistema causada pela variação da velocidade de escoamento.	101
A.1	Gráfico dos ramos reais da função W de Lambert.	110
A.2	Gráfico de $y(t)$ para diferentes valores da condição inicial y_0	116

Lista de Tabelas

2.1	Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação exponencial da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.001$ s.	29
2.2	Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação exponencial da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.1$ s.	30
2.3	Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação linear da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.001$ s.	30
2.4	Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação linear da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.1$ s.	31
7.1	Parâmetros do reator.	87
7.2	Perturbações na SCM de absorção e reatividades resultantes.	88
7.3	Desvios máximos, em pcm, entre as reatividades ρ_{ci} e ρ_{in} , para variação exponencial da velocidade.	88
7.4	Desvios máximos, em pcm, entre as reatividades ρ_{ci} e ρ_{in} , para variação linear da velocidade.	89
7.5	Erro relativo máximo, em %, entre o fator de amplitude P_{cp} calculado pelas ECP e o fator de amplitude P_{in} , para variação exponencial da velocidade.	90
7.6	Erro relativo máximo, em %, entre o fator de amplitude P_{cp} calculado pelas ECP e o fator de amplitude P_{in} , para variação linear da velocidade.	91

Lista de Símbolos

A_r	Área da seção transversal do reator, p. 12
A_t	Área da seção transversal da tubulação, p. 12
C_i	Concentração de precursores da família i , p. 8
D	Coeficiente de difusão, p. 9
$F(t)$	Fator de normalização das ECP, p. 51
G	Número total de grupos da teoria de difusão multigrupo, p. 9
$G_i(t)$	Fator de amplitude da concentração de precursores da i -ésima família, p. 49
H	Altura do reator, p. 9
I	Número total de famílias de precursores, p. 9
L	Comprimento total da tubulação externa, p. 9
N	Número de divisões na discretização espacial, p. 65
$P(t)$	Fator de amplitude do fluxo de nêutrons, p. 49
P_{cp}	Fator de amplitude calculado pelas ECP, p. 89
P_{in}	Fator de amplitude usado de entrada nas ECI, p. 89
T_{crit}	Tempo crítico de transiente (linear) da bomba, p. 16
ΔT	Passo temporal da atualização da forma espacial dos precursores, p. 76

Δt	Passo temporal, p. 27
Δx	Distância percorrida pelos precursores dentro da tubulação, p. 14
Δx_p	Distância percorrida pelos precursores durante o transiente (linear) da bomba, p. 16
Δz	Tamanho da malha axial, p. 65
Λ	Tempo médio de geração de nêutrons, p. 51
Λ_i	Tempo médio de vida da i -ésima família de precursores devido ao escoamento do combustível, p. 51
Σ_R	SCM de remoção, p. 68
Σ_f	SCM de fissão, p. 9
$\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$	SCM diferencial de espalhamento do grupo de energia g' para o grupo g , p. 9
Σ_t	SCM total, p. 9
α	Aceleração do combustível durante um transiente linear, p. 16
α_f	Coefficiente de reatividade do combustível, ou coeficiente Doppler, p. 57
α_m	Coefficiente de reatividade do moderador, p. 57
β	Fração total de nêutrons atrasados, p. 9
β_i	Fração de nêutrons atrasados da i -ésima família de precursores, p. 9
C_i^*	Concentração adjunta de precursores da i -ésima família, p. 11
χ_i	Espectro de energia dos nêutrons atrasados da i -ésima família de precursores, p. 9
χ_p	Espectro de energia dos nêutrons prontos, p. 9

∇	Operador divergência, p. 8
$\delta_{gg'}$	Delta de Kronecker, p. 9
\dot{m}_f	Vazão mássica do combustível, p. 12
η_i	Parâmetro relativo ao escoamento dos precursores da i -ésima família pela saída do reator, p. 51
ϕ_g^*	Fluxo adjunto de nêutrons do grupo g de energia, p. 11
$\hat{\beta}_i$	Fração efetiva de nêutrons da i -ésima família de precursores, p. 51
$\hat{\lambda}_i$	Constante de decaimento modificada para a i -ésima família de precursores, p. 51
κ	Constante de decaimento da bomba em um transiente exponencial, p. 22
k_{eff}	Fator de multiplicação efetivo, p. 11
λ_i	Constante de decaimento da i -ésima família de precursores, p. 9
0	Matriz nula, p. 68
I	Matriz identidade, p. 68
u	Velocidade de escoamento (vetor), p. 8
$\mathcal{L}\{\cdot\}(s)$	Transformada de Laplace, p. 60
$\mathcal{L}^{-1}\{\cdot\}(t)$	Transformada inversa de Laplace, p. 62
μ_i	Parâmetro relativo ao efeito da perturbação da velocidade de escoamento na concentração de precursores da i -ésima família decaindo no núcleo, p. 51
ν	Número médio de nêutrons emitidos pela fissão, p. 9
\bar{T}_f	Temperatura média do combustível, p. 57

\bar{T}_m	Temperatura média do moderador, p. 57
ϕ_g	Fluxo de nêutrons do grupo g de energia, p. 9
\mathbf{r}	Vetor posição (x, y, z) , p. 8
P_{ot}	Potência nuclear, p. 35
ρ	Reatividade, p. 45
ρ_f	Densidade do combustível, p. 12
ρ_{ci}	Reatividade calculada pelas ECI, p. 87
ρ_{comb}	Reatividade proveniente da variação de temperatura do combustível (efeito Doppler), p. 57
ρ_{ext}	Reatividade externa, p. 57
ρ_{in}	Reatividade usada de entrada nas ECP, p. 87
ρ_{mod}	Reatividade proveniente da variação de temperatura do moderador, p. 57
σ_i	Parâmetro relativo à reentrada dos precursores da i -ésima família, p. 51
τ	Tempo de trânsito dos precursores na tubulação externa, p. 10
τ_0	Tempo de trânsito inicial, p. 14
τ_f	Tempo de trânsito final, p. 14
τ_{exp}	Tempo de trânsito para variação exponencial da velocidade, p. 29
τ_{lin}	Tempo de trânsito para variação linear da velocidade, p. 29
τ_{num}	Tempo de trânsito calculado numericamente, p. 29
\tilde{C}_i	Forma espacial dos precursores da i -ésima família, p. 49
\tilde{L}	Comprimento redimensionado da tubulação, p. 12

T_p	Duração do transiente da bomba de circulação em um transiente linear, p. 16
u_f	Velocidade final, p. 13
W_n	n -ésimo ramo da função W de Lambert, p. 62
ξ_i	Fração de precursores da família i que retornam ao núcleo, p. 10
g	g -ésimo grupo de energia da teoria de difusão multigrupo, p. 9
i	i -ésima família de precursores, p. 9
s	Número de passos nos quais resolvem-se as ECP entre dois cálculos consecutivos da forma espacial, p. 76
t_f	Instante final do transiente, p. 27
u	Velocidade de escoamento (escalar), p. 8
u_0	Velocidade inicial, p. 13
u_r	Velocidade de escoamento na região do reator, p. 12
u_t	Velocidade de escoamento na região da tubulação, p. 12
v	Velocidade do nêutron, p. 9
w	Energia média liberada por fissão, p. 35
z	Posição no eixo axial, p. 9
$\text{Im}(z)$	Parte imaginária de um número complexo z , p. 63
$\text{Re}(z)$	Parte real de um número complexo z , p. 63

Lista de Abreviaturas

ARE	<i>Aircraft Reactor Experiment</i> - Experimento de Reator de Avião, p. 3
ECI	Equações da cinética inversa, p. 56
ECP	Equações da cinética pontual, p. 47
GFR	<i>Gas-Cooled Fast Reactor</i> - Reator Rápido Refrigerado a Gás, p. 2
LFR	<i>Lead-Cooled Fast Reactor</i> - Reator rápido Refrigerado a Chumbo, p. 2
LWR	<i>Light-Water Reactor</i> - Reator a Água Leve, p. 2
MSRE	<i>Molten-Salt Reactor Experiment</i> - Experimento de Reator a Sal Fundido, p. 4
MSR	<i>Molten Salt Reactor</i> - Reator a Sal Fundido, p. 2
ORNL	<i>Oak Ridge National Laboratory</i> - Laboratório Nacional de Oak Ridge, p. 3
SCM	Seção de choque macroscópica, p. 9
SCWR	<i>Supercritical-Water-Cooled Reactor</i> - Reator Refrigerado a Água Supercrítica, p. 2
SFR	<i>Sodium-Cooled Fast Reactor</i> - Reator Rápido Refrigerado a Sódio, p. 2

VHTR *Very-High-Temperature Reactor* - Reator de Temperatura
Muito Alta, p. 2

Capítulo 1

Introdução

1.1 Energia nuclear na atualidade

Tem-se discutido bastante nos últimos anos a aceitação pública da energia nuclear, em especial as questões sobre armazenamento e gerenciamento dos rejeitos nucleares, que são gerados em todas as etapas do ciclo de combustível. Os rejeitos de alta reatividade são constituídos de elementos transurânicos e produtos de fissão, que são gerados no núcleo do reator, e podem ter meia-vida da ordem de milhares de anos. Nas usinas do complexo de Angra, estes rejeitos ficam armazenados em piscinas especiais dentro dos prédios de segurança das usinas, e futuramente podem ser reprocessados para serem reaproveitados.

Ao longo da história da energia nuclear, esse setor continuamente foca em aperfeiçoar os processos de minimização de geração, tratamento e isolamento dos rejeitos, e está no caminho para superar o principal problema de longas meia-vidas dos materiais de alta atividade. A nova geração de reatores sendo desenvolvido possuem soluções para reduzir consideravelmente o tempo de vida dos rejeitos radioativos de alta radioatividade usando, por exemplo, o processo de transmutação, podendo inclusive ser usado em rejeitos já existentes. Com o avanço dessas novas tecnologias, a energia nuclear passa a ser cada vez mais compatível com as metas de desenvolvimento sustentável.

A evolução dos reatores nucleares é comumente dividida em quatro gerações [1]: geração I (1950-1970) – primeiros protótipos de diversos *designs* de reatores; geração II (1970-1995) – usinas nucleares comerciais, com operação confiável e com-

petitividade econômica; geração III/III+ (1995-2030) – evolução dos reatores a água leve (*light-water reactor* - LWR) de segunda geração; geração IV (2030+) – *designs* que descontinuam os de geração III e introduzem novas tecnologias.

Os reatores de quarta geração são *designs* de reatores nucleares atualmente em desenvolvimento para aplicações comerciais, possuindo como objetivo aumentar a segurança e diminuir a geração de rejeitos radioativos, além de melhorias mais gerais como sustentabilidade, eficiência e custo [2]. Alguns tipos de reatores dessa geração são: reator rápido refrigerado a gás (*gas-cooled fast reactor* - GFR), reator rápido refrigerado a chumbo (*lead-cooled fast reactor* - LFR), reator a sal fundido (*molten salt reactor* - MSR), reator refrigerado a água supercrítica (*supercritical-water-cooled reactor* - SCWR), reator rápido refrigerado a sódio (*sodium-cooled fast reactor* - SFR) e reator de temperatura muito alta (*very-high-temperature reactor* - VHTR).

1.2 Reator a sal fundido

Nos *designs* de reatores a sal fundido, o combustível é diluído no refrigerante, que consiste de uma mistura de sais fundidos, como fluoretos [3]. Como o combustível está misturado no refrigerante, eles escoam juntos pelo reator e pela tubulação externa do sistema primário, alterando assim a neuttrônica do reator. Entretanto, o escoamento do combustível aprimora significativamente o processo de remoção de calor do núcleo, pois o transporte de calor dentro da região do combustível é feito, além da condução, também por convecção, o que não acontece nos reatores com combustível sólido. Isto, por sua vez, aumenta a segurança do reator e facilita o processo de recarga [4][5][6]. Algumas outras vantagens do MSR são [7]: a ausência de necessidade de fabricação de combustível sólido, o que reduz o custo do ciclo do combustível e problemas com criticalidade; composição homogênea do combustível, evitando pontos quentes e possibilitando ciclos regeneradores mesmo em *designs* térmicos; possibilidade de remoção de todo o combustível em casos de acidentes; alta temperatura de operação, o que aumenta a eficiência do ciclo térmico; e a possibilidade de reabastecimento em tempo real.

Apesar de possuir vantagens em comparação com reatores com combustível

sólido, problemas importantes também surgem nos *designs* de MSR, alguns dos quais são [8]: corrosão dos materiais estruturais, causada pelos produtos de fissão (especialmente telúrio) e pela alta temperatura e velocidade de escoamento do sal fundido; produção de trítio nos *designs* com sais contendo lítio, que pode-se tornar um risco à saúde caso escape para o ambiente e forme água tritiada; e a necessidade de plantas químicas complexas para realizar a separação dos produtos de fissão, trítio e outros isótopos radioativos.

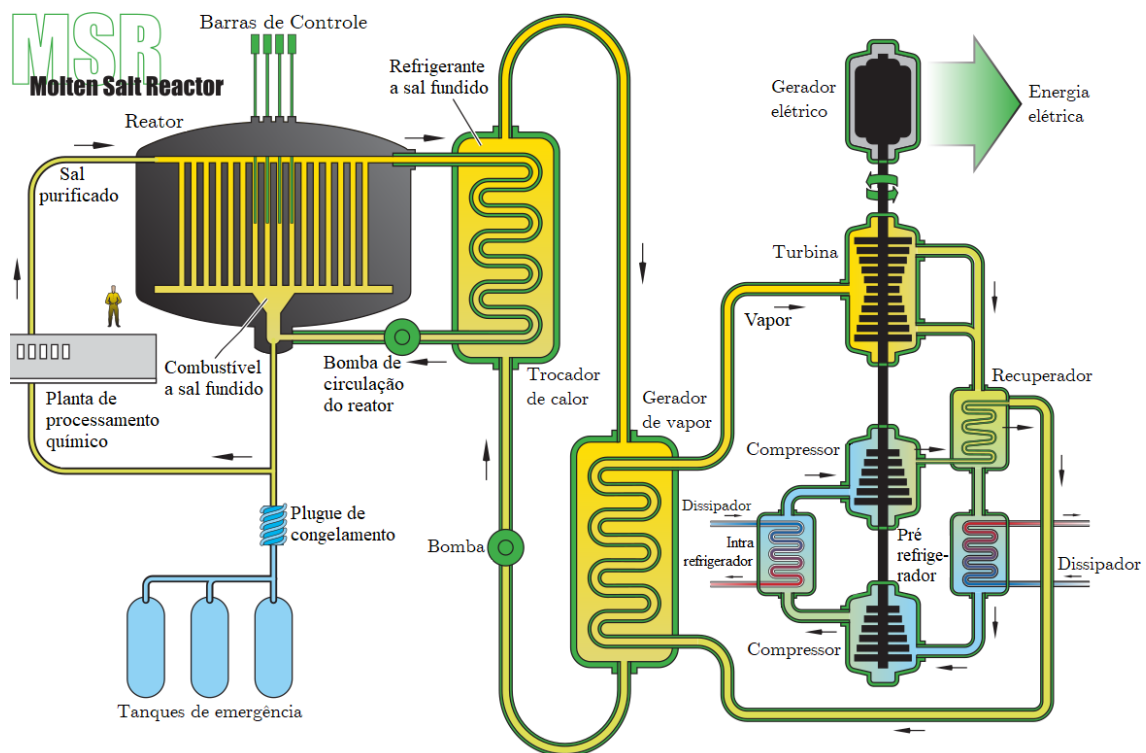


Figura 1.1: Exemplo esquemático de um reator a sal fundido – Fonte: *US - Department of Energy - Nuclear Energy Research - Advisory Committee*, adaptado.

A figura 1.1 mostra o esquema de um reator a sal fundido. No século XX, dois dos mais conhecidos projetos desse tipo de reator foram feitos no Laboratório Nacional de Oak Ridge (*Oak Ridge National Laboratory* - ORNL). São eles [9]:

- *Aircraft Reactor Experiment* (ARE), operado entre 3 e 12 de Novembro de 1954. Possuía combustível formado por uma mistura de fluoretos de sódio e zircônio, na qual o fluoreto de urânio, com 93% de enriquecimento, estava dissolvido ($\text{NaF-ZrF}_4\text{-}^{235}\text{UF}_4$, 53-41-6 mol%). Esse reator era moderado por óxido de berílio (BeO) e tinha sódio líquido como segundo refrigerante. Operou a uma potência térmica nominal de 2.5 MW.

- *Molten-Salt Reactor Experiment* (MSRE) foi operado entre Junho de 1965 e Dezembro de 1969. Seu combustível era formado por fluoretos de lítio-7, berílio e zircônio ($\text{LiF-BeF}_2\text{-ZrF}_4\text{-UF}_4$, 65-29-5-1 mol%), sendo com urânio enriquecido, em um primeiro momento, de U-235, e posteriormente com U-233. Era moderado por grafite e tinha como refrigerante secundário uma mistura de fluoretos de lítio e berílio (2LiF-BeF_2 , 66%-34%). Foi operado a uma potência térmica nominal de 7.4 MW.

Como a circulação do combustível líquido altera significativamente a neutrônica do reator, torna-se necessário uma modelagem física e matemática diferente daquela do combustível sólido clássico. Desta forma, o estudo da neutrônica desse tipo de combustível é de suma importância para o desenvolvimento do MSR e de outros reatores com *designs* baseados em combustíveis líquidos.

1.3 Cinética pontual de nêutrons e cinética inversa

O transporte de nêutrons em um combustível circulante pode ser modelado pela teoria de difusão de nêutrons de maneira similar ao caso clássico de combustível sólido. De fato, a equação de difusão é a mesma, com mudanças ocorrendo apenas nas equações de balanço dos precursores de nêutrons atrasados. Isso, no entanto, altera consideravelmente a distribuição de nêutrons no reator, principalmente a dos nêutrons atrasados [10][11][12][13], causando efeitos importantes na resposta do reator a perturbações.

A aproximação de cinética pontual de nêutrons é uma ferramenta útil para calcular variações na potência do reator causadas por perturbações, como movimentação de barras de controle ou variação da velocidade de escoamento. A principal vantagem dessa aproximação é seu baixo custo computacional em comparação com a cinética espacial, que é obtida ao realizar aproximações sobre a forma espacial da população de nêutrons, levando a um modelo mais simples. No entanto, essas aproximações devem ser analisadas detalhadamente, pois, embora sejam válidas para o caso de combustível sólido, elas podem não reproduzir de forma precisa o caso de combustível líquido [14]. Na literatura podem ser encontrados diversos modelos para

a cinética espacial e a dinâmica de MSR, com geometrias unidimensionais [15][16], bidimensionais [17][18][19][20][21], e tridimensionais [22][23]. Especificamente para a cinética pontual, há tanto modelos considerando realimentação termo-hidráulica [24][25], quanto modelos com foco exclusivo na neutrônica [26][27][28].

Uma das aplicações mais importantes da cinética pontual é no seu problema inverso. No problema direto, a variação da potência nuclear é determinada a partir das perturbações conhecidas no sistema, que são representadas pelo parâmetro cinético da reatividade. Já no problema inverso, o objetivo é encontrar a variação necessária da reatividade para obter uma determinada variação de potência desejada. Este problema é chamado de cinética inversa.

Algumas das aplicações da cinética inversa são na determinação da reatividade inserida pela movimentação das barras de controle [29][30], que também pode ser usada para fins de calibração [31][32], e na modelagem de um reatímetro para monitoração tanto da reatividade [33] quanto da intensidade da fonte externa de nêutrons [34][35].

1.4 Objetivos

Este trabalho tem por objetivo modelar a cinética inversa de reatores a sal fundido (MSR) a partir de um modelo de cinética pontual [27][36], que é obtido pela metodologia de Henry [37] para a dedução das equações. O modelo desenvolvido é, então, testado usando seus resultados na cinética pontual (problema direto) de forma a verificar a consistência de suas soluções, e posteriormente é aplicado em dois casos de interesse do MSR: uma variação linear entre diferentes níveis de potência do reator, e a determinação das regiões de criticalidade do núcleo, que são importantes para manter a subcriticalidade do reator e garantir sua segurança. Também são propostos métodos de solução numérica do modelo, além de soluções analíticas e semi-analíticas de aproximações relevantes.

1.5 Organização do texto

No capítulo 2 são apresentadas as equações da neutrônica do MSR: cinética espacial, estado estacionário e equações adjuntas. Neste capítulo também é deta-

lhado o cálculo do tempo de trânsito na tubulação externa para diferentes variações possíveis da velocidade de escoamento do combustível. O cálculo do tempo de trânsito é de suma importância para a cinética do reator, visto que é o parâmetro que está diretamente ligado ao principal fenômeno do MSR: a circulação do combustível e consequente decaimento dos precursores na tubulação.

No capítulo 3, as equações do sistema estacionário são resolvidas semi-analiticamente para um caso simples, a fim de comparar com o caso clássico de combustível sólido, além de encontrar os casos limites do problema e suas soluções. Ao final, analisa-se a influência da velocidade de escoamento sobre as variáveis do sistema: fluxo de nêutrons, concentração de precursores, e fator de multiplicação.

No capítulo 4 deduzimos o modelo de cinética pontual a partir das equações da cinética espacial, do sistema estacionário e das variáveis adjuntas, seguindo uma metodologia similar à de Henry [37], e usando uma aproximação quase-estática para a forma espacial da concentração de precursores. Os parâmetros cinéticos resultantes dessa dedução são comparados com os encontrados na cinética pontual de combustíveis sólidos, a fim de caracterizar apropriadamente os parâmetros que estão diretamente relacionados ao escoamento do combustível.

No capítulo 5, o modelo de cinética inversa é apresentado e uma solução semi-analítica é deduzida para o problema, além de uma solução analítica a partir de uma aproximação. Essa última é interessante pois advém de uma característica peculiar das equações do problema, que são do tipo diferenciais atrasadas. Também é mostrado como o modelo desenvolvido pode ser generalizado para os casos nos quais a realimentação termohidráulica é considerada.

No capítulo 6 são apresentadas as soluções numéricas das diferentes equações diferenciais encontradas neste trabalho. São mostrados os métodos usados para resolver tanto os problemas com dependência espacial (sistema estacionário e variáveis adjuntas) quanto os com dependência espaço-temporal (cinética espacial). Na cinética pontual e inversa, a dependência espaço-temporal é separada: a dependência temporal encontra-se no fator de amplitude dos precursores e no do fluxo, no caso da cinética pontual, ou na reatividade, no caso da cinética inversa. A dependência espacial encontra-se, em ambos, na forma espacial dos precursores, que é usada para a atualização dos parâmetros cinéticos.

No capítulo 7, os resultados obtidos nesta tese são apresentados. A cinética inversa é aplicada a dois transientes do MSR e seus resultados são discutidos. Além disso, também são realizados dois testes para verificar a consistência das soluções obtidas pelo modelo da cinética inversa.

No capítulo 8 são apresentadas as conclusões desta tese e propostas algumas outras possíveis aplicações da cinética inversa em casos de interesse do MSR, além de uma possível perspectiva para continuação deste trabalho.

No apêndice A, a função W de Lambert é explicada em maior detalhe, sendo mostrada sua importância na solução analítica de algumas equações diferenciais, em especial no cálculo do tempo de trânsito dos precursores.

Capítulo 2

Modelagem Matemática de um Reator a Sal Fundido

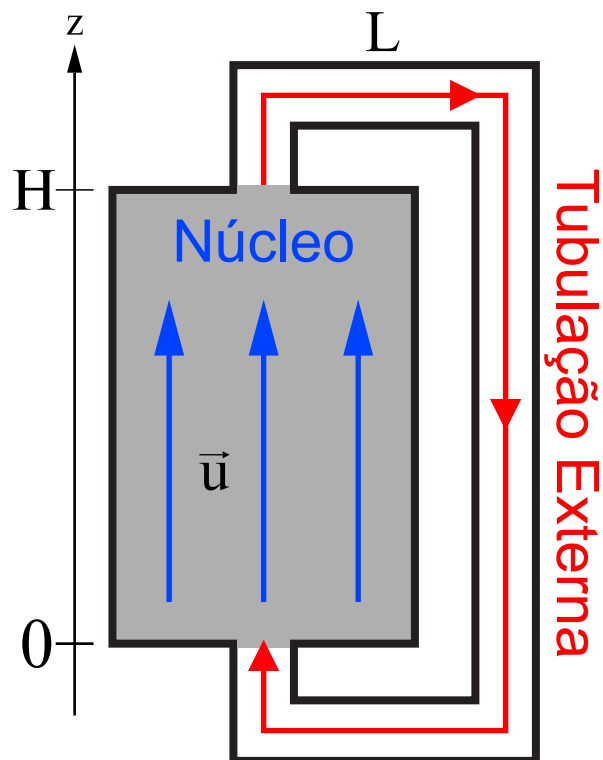


Figura 2.1: Representação unidimensional de um reator com combustível líquido: H - altura do reator; L - comprimento linear total da tubulação externa; \mathbf{u} - velocidade de escoamento.

Nos reatores a sal fundido, o combustível encontra-se dissolvido no refrigerante formado por sais fundidos e circula pelo sistema primário. Este é composto pelo núcleo, que pode conter grafite como moderador nos modelos térmicos ou uma região com isótopos férteis (*blanket*) nos modelos de reatores rápidos reprodutores, e

pela tubulação externa, onde o calor gerado pela fissão é removido por um trocador de calor. Considera-se que ocorra fissão apenas dentro da região do núcleo, sendo desprezada a energia gerada dentro da tubulação seja devido à sua geometria mais favorável à fuga de nêutrons, seja pela ausência de elementos moderadores. Ou seja, consideramos que a tubulação externa está neutronicamente isolada do reator [27]. A figura 2.1 apresenta o modelo de um reator unidimensional que será utilizado neste trabalho.

O escoamento do combustível influencia na distribuição dos nêutrons no núcleo, mais especificamente alterando a distribuição dos precursores $C_i(\mathbf{r}, t)$. Esse efeito se manifesta nas suas equações, que passam a ter um termo relativo ao escoamento para considerar o deslocamento dos precursores junto com o fluido, cuja velocidade é determinada pelas bombas de circulação do sistema. Esse termo convectivo é dado por

$$\nabla \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) C_i(\mathbf{r}, t)), \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ é a velocidade de escoamento do combustível e $\nabla \cdot$ é o operador divergência. O caso de combustível sólido é recuperado ao tomarmos o limite $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \rightarrow \mathbf{0}$. No modelo unidimensional que será usado, a velocidade $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ possui apenas a componente axial, com módulo uniforme: $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = u(t) \hat{e}_z$.

Na próxima seção, são apresentadas as equações da neutrônica do MSR: as equações da cinética espacial, do sistema estacionário, e das variáveis adjuntas, juntamente de suas condições iniciais e de contorno.

2.1 Equações do MSR

As equações da cinética espacial para o fluxo de nêutrons $\phi_g(z, t)$, baseado na teoria de difusão multigrupo para cada grupo $g = 1, \dots, G$ de energia e sem fonte externa de nêutrons, e as equações para as concentrações de precursores $C_i(z, t)$ de cada família $i = 1, \dots, I$ são dadas por

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g}{\partial t} = D_g \frac{\partial^2 \phi_g}{\partial z^2} + \sum_{g'=1}^G \left\{ \Sigma_{s,g' \rightarrow g} + (1 - \beta) \chi_{p,g} \nu \Sigma_{f,g'} - \Sigma_{t,g} \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'} + \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_i, \quad (2.2a)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \beta_i \sum_{g=1}^G \nu \Sigma_{f,g} \phi_g - u(t) \frac{\partial C_i}{\partial z} - \lambda_i C_i, \quad (2.2b)$$

onde $\Sigma_{t,g}$ e $\Sigma_{f,g}$ são as seções de choque macroscópicas (SCM) total e de fissão, respectivamente, $\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$ é a SCM diferencial de espalhamento, $\chi_{p,g}$ e $\chi_{i,g}$ são os espectros de energia dos nêutrons prontos e atrasados, respectivamente, v_g é a velocidade do nêutron e ν é o número médio de nêutrons emitidos pela fissão. Cada parâmetro é respectivo ao grupo g de energia. Em relação aos parâmetros dos precursores, λ_i e β_i são a constante de decaimento e a fração de nêutrons atrasados, respectivamente, da i -ésima família e β é a soma de todos os β_i . O símbolo $\delta_{gg'}$ é o delta de Kronecker, ou seja, vale 1 quando $g' = g$, e 0 em caso contrário. As condições iniciais e de contorno são dadas por

$$\phi_g(0, t) = 0 = \phi_g(H, t), \quad (2.3a)$$

$$\phi_g(z, 0) = \phi_g^0(z), \quad (2.3b)$$

$$C_i(0, t) = C_i(H, t - \tau(t)) \xi_i(t), \quad (2.3c)$$

$$C_i(z, 0) = C_i^0(z). \quad (2.3d)$$

Os parâmetros específicos do sistema de combustível fluido são o tempo de trânsito (ou de circulação) na tubulação externa, $\tau(t)$, e a fração de precursores que não decaíram durante o tempo que permaneceram fora do núcleo, $\xi_i(t) \equiv \exp(-\lambda_i \tau(t))$, oriunda da lei de decaimento radioativo. A condição de contorno para o fluxo é a condição de vácuo, ou seja, fluxo nulo nas fronteiras, que é a mesma comumente usada para o caso de combustível sólido. Já para os precursores, a condição de contorno é de reentrada: a concentração de precursores que reentram no núcleo ($z = 0$) no instante t é igual à concentração de precursores que saíram do núcleo ($z = H$) em um instante anterior $t - \tau(t)$ e que não decaíram durante o tempo $\tau(t)$ que transitavam pela tubulação externa.

As condições iniciais do problema são dadas pela solução do sistema estacionário, cujas equações são obtidas ao tornar nulas as derivadas temporais:

$$0 = D_g^0 \frac{d^2 \phi_g^0}{dz^2} + \sum_{g'=1}^G \left\{ \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^0 + (1 - \beta) \chi_{p,g} \frac{\nu \Sigma_{f,g'}^0}{k_{eff}} - \Sigma_{t,g}^0 \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'}^0 + \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_i^0, \quad (2.4a)$$

$$0 = \beta_i \sum_{g=1}^G \frac{\nu \Sigma_{f,g}^0}{k_{eff}} \phi_g^0 - u_0 \frac{dC_i^0}{dz} - \lambda_i C_i^0, \quad (2.4b)$$

com as seguintes condições de contorno:

$$\phi_g^0(0) = 0 = \phi_g^0(H), \quad (2.5a)$$

$$C_i^0(0) = C_i^0(H) \xi_i^0, \quad (2.5b)$$

onde o índice 0 indica o valor que o respectivo parâmetro possuía durante a operação crítica do reator antes do transiente ($t < 0$). O fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , foi acrescentado para modelar o cálculo de criticalidade, que será visto nas próximas seções.

Para deduzir, posteriormente, as equações da cinética pontual, é necessário definir as variáveis adjuntas relacionadas às variáveis do sistema estacionário e que são usadas como pesos nas definições dos parâmetros cinéticos, para reduzir o erro associado com essa aproximação [37]. No caso no qual não há fonte externa de nêutrons, as equações para o fluxo adjunto de nêutrons $\phi_g^*(z)$, e para a concentração adjunta de precursores $C_i^*(z)$, são dadas por [14][27]

$$0 = D_g^0 \frac{d^2 \phi_g^*}{dz^2} + \sum_{g'=1}^G \left\{ \Sigma_{s,g \rightarrow g'}^0 + (1 - \beta) \chi_{p,g'} \frac{\nu \Sigma_{f,g}^0}{k_{eff}} - \Sigma_{t,g}^0 \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'}^* + \frac{\nu \Sigma_{f,g}^0}{k_{eff}} \sum_{i=1}^I \beta_i C_i^*, \quad (2.6a)$$

$$0 = \lambda_i \sum_{g=1}^G \chi_{i,g} \phi_g^* + u_0 \frac{dC_i^*}{dz} - \lambda_i C_i^*, \quad (2.6b)$$

com condições de contorno simétricas às do sistema estacionário [27]:

$$\phi_g^*(0) = 0 = \phi_g^*(H), \quad (2.7a)$$

$$C_i^*(H) = C_i^*(0) \xi_i^0. \quad (2.7b)$$

O tempo de trânsito $\tau(t)$ é um parâmetro importante da neutrônica do MSR, pois está relacionado diretamente com a quantidade de nêutrons atrasados perdidos da reação em cadeia devido ao decaimento de seus precursores fora do reator. Quando a velocidade de escoamento varia durante um transiente, o cálculo deste parâmetro pode se tornar bastante complexo. Na próxima seção, é feito o cálculo analítico do tempo de trânsito para alguns perfis de velocidade, além de ser proposto um método numérico para determiná-lo em qualquer caso de variação da velocidade.

2.2 Cálculo do tempo de trânsito

O tempo de trânsito $\tau(t)$ é o tempo que os precursores permanecem dentro da tubulação e é usado para calcular a fração de precursores que decaíram fora do reator. Um precursor saindo do reator no instante $t - \tau(t)$ reentra no instante t , percorrendo o comprimento L da tubulação com velocidade $u(t)$. A expressão matemática é dada por

$$\int_{t-\tau(t)}^t u(t') dt' = L. \quad (2.8)$$

Como τ aparece no limite inferior da integral, sua solução analítica torna-se complicada ou até mesmo impossível para variações temporais mais complexas da velocidade de escoamento. Apesar disso, é possível encontrar soluções analíticas para algumas velocidades com perfis temporais de interesse: variação linear entre a velocidade inicial u_0 e a final u_f durante um tempo de transiente T_p da bomba de circulação; decaimento exponencial a partir da velocidade inicial até uma velocidade final assintótica; e variação instantânea da velocidade, que também pode ser visto como o limite dos casos anteriores [38].

Deve-se notar que a velocidade real do combustível dentro da tubulação não é igual à dentro do reator, pois essas duas regiões possuem áreas de suas seções transversais diferentes. É a vazão mássica (e também a volumétrica, se for desprezada a variação de densidade entre as regiões causada pela diferença de temperatura) que se mantém uniforme. A relação entre as velocidades em cada região é dada pela equação de continuidade:

$$\dot{m}_f = \rho_f u_r A_r = \rho_f u_t A_t, \quad (2.9)$$

onde \dot{m}_f e ρ_f são a vazão mássica e a densidade do combustível, respectivamente, u_r e u_t são as velocidades dentro do reator e dentro da tubulação, respectivamente, e A_r e A_t são as áreas da seção transversal do reator e da tubulação, respectivamente.

No entanto, se colocarmos a velocidade dentro da tubulação $u_t(t')$ na equação (2.8) em função da velocidade no reator, u_r , podemos obter a expressão para o tempo de trânsito $\tau(t)$ em função da velocidade no reator. Assim:

$$L = \int_{t-\tau(t)}^t u_t(t') dt' = \frac{A_r}{A_t} \int_{t-\tau(t)}^t u_r(t') dt' \rightarrow \int_{t-\tau(t)}^t u_r(t') dt' =: \tilde{L},$$

onde $\tilde{L} \equiv L A_t/A_r$ pode ser interpretado como um comprimento da tubulação redimensionado [10]. Por simplicidade, neste trabalho, a velocidade de escoamento usada será sempre a do reator e, para o cálculo do tempo de trânsito, o comprimento da tubulação L será considerado o comprimento redimensionado pelo fator A_t/A_r .

2.2.1 Variação Instantânea

Como o caso de variação instantânea é o mais simples, será resolvido primeiro. Neste caso, a velocidade possui o seguinte perfil:

$$u(t) = \begin{cases} u_0, & \text{se } t < 0, \\ u_f, & \text{se } t \geq 0, \end{cases} \quad (2.10)$$

conforme o gráfico mostrado na figura 2.2. Os valores das velocidades inicial (50 cm/s) e final (2 cm/s) escolhidas são típicos para o combustível circulante durante a operação normal e no caso de circulação natural, respectivamente [20][39].

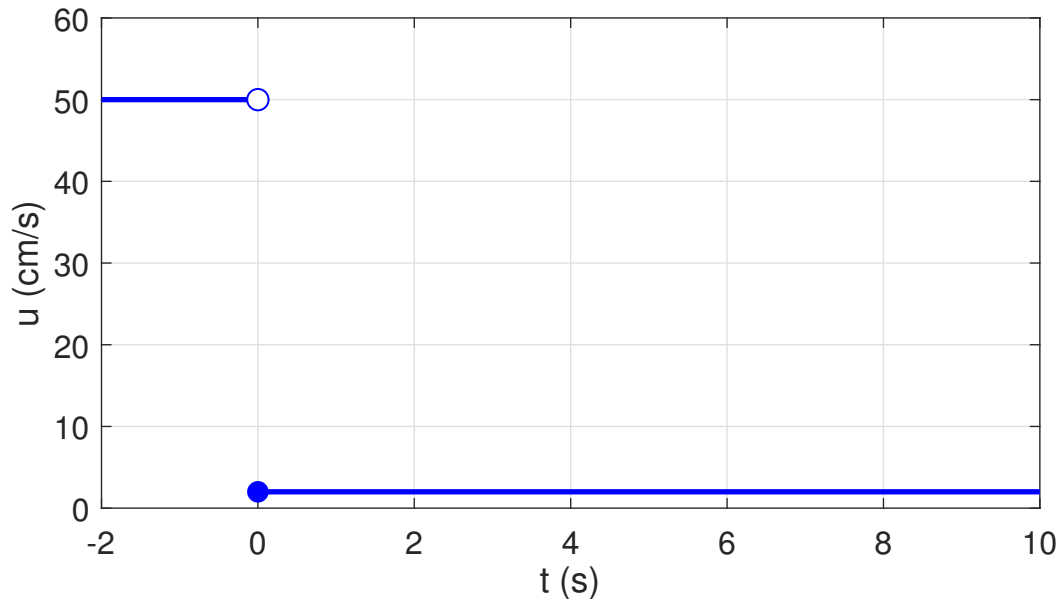


Figura 2.2: Variação instantânea da velocidade, com $u_0 = 50$ cm/s e $u_f = 2$ cm/s.

Há dois intervalos de tempo nos quais a expressão para $\tau(t)$ é trivial. Quando os precursores reentram no reator em um instante $t < 0$, eles percorrem toda a tubulação com velocidade constante igual a u_0 :

$$u_0 \int_{t-\tau(t)}^t dt' = L, \quad (2.11)$$

$$\tau(t) = \frac{L}{u_0} \equiv \tau_0.$$

Da mesma forma, a partir de um certo instante T , que será calculado posteriormente, todos os precursores que reentraram no reator em um instante $t \geq T$ terão percorrido a tubulação com velocidade constante igual a u_f . Assim, analogamente ao caso anterior:

$$\tau(t) = \frac{L}{u_f} \equiv \tau_f. \quad (2.12)$$

Para instantes $0 \leq t < T$, os precursores que voltam ao reator terão percorrido parte da tubulação com velocidade u_0 e o restante com u_f , conforme ilustra a figura 2.3.

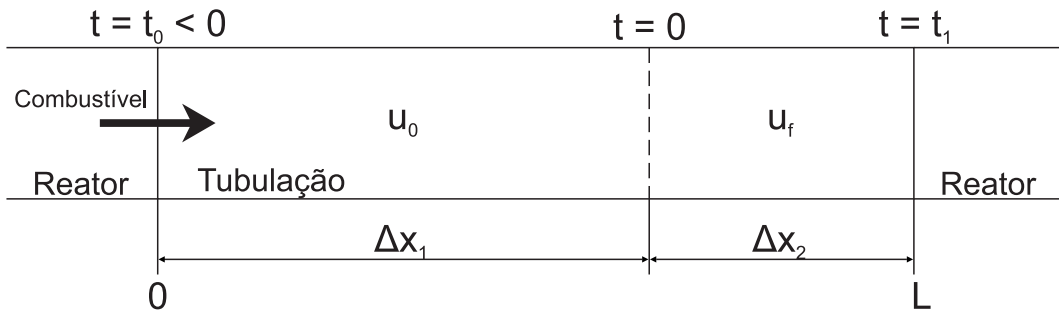


Figura 2.3: Situação onde o precursor percorre parte da tubulação com velocidade u_0 e parte com u_f .

As distâncias Δx_1 e Δx_2 da figura 2.3 são dadas por:

$$\Delta x_1 = u_0(0 - t_0) = -u_0 t_0, \quad (2.13a)$$

$$\Delta x_2 = u_f(t_1 - 0) = u_f t_1. \quad (2.13b)$$

Sabendo que $\Delta x_1 + \Delta x_2 = L$ e que $\tau = t_1 - t_0$:

$$L = u_f t_1 - u_0(t_1 - \tau) \rightarrow \tau = \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} t_1. \quad (2.14)$$

Como t_1 é, por definição, o instante em que o precursor reentra no reator, ele pode ser substituído por t , pois é o mesmo instante avaliado do lado esquerdo da condição de contorno (2.3c), que é a condição sobre a entrada no reator:

$$\tau(t) = \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} t + \tau_0, \quad \text{se } 0 \leq t < T. \quad (2.15)$$

O instante T , limite superior na qual essa expressão é válida, é o instante em que Δx_1 é nulo. Assim:

$$\begin{aligned} u_f(T - 0) &= L, \\ T &= \frac{L}{u_f} = \tau_f. \end{aligned} \quad (2.16)$$

A expressão final para $\tau(t)$ é, então, uma função definida em 3 partes:

$$\tau(t) = \begin{cases} \tau_0, & \text{se } t < 0, \\ \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f}t + \tau_0, & \text{se } 0 \leq t < \tau_f, \\ \tau_f, & \text{se } t \geq \tau_f, \end{cases} \quad (2.17)$$

com gráfico mostrado figura 2.4.

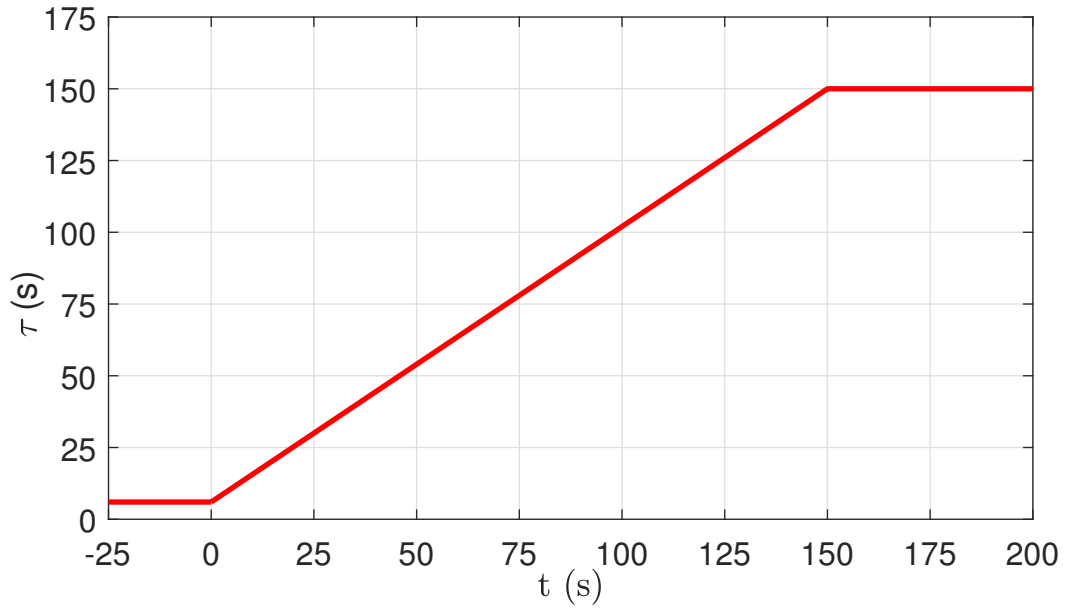


Figura 2.4: Variação do tempo de trânsito para variação instantânea da velocidade, com $u_0 = 50$ cm/s, $u_f = 2$ cm/s e $L = 300$ cm.

2.2.2 Variação Linear

No caso de variação linear da velocidade de escoamento, o transiente da bomba de circulação dura um tempo T_p , com a velocidade se mantendo constante e

igual a u_f após:

$$u(t) = \begin{cases} u_0, & \text{se } t < 0, \\ \alpha t + u_0, & \text{se } 0 \leq t < T_p, \\ u_f, & \text{se } t \geq T_p, \end{cases} \quad (2.18)$$

onde

$$\alpha \equiv \frac{u_f - u_0}{T_p}. \quad (2.19)$$

A figura 2.5 mostra o gráfico da velocidade variando linearmente.

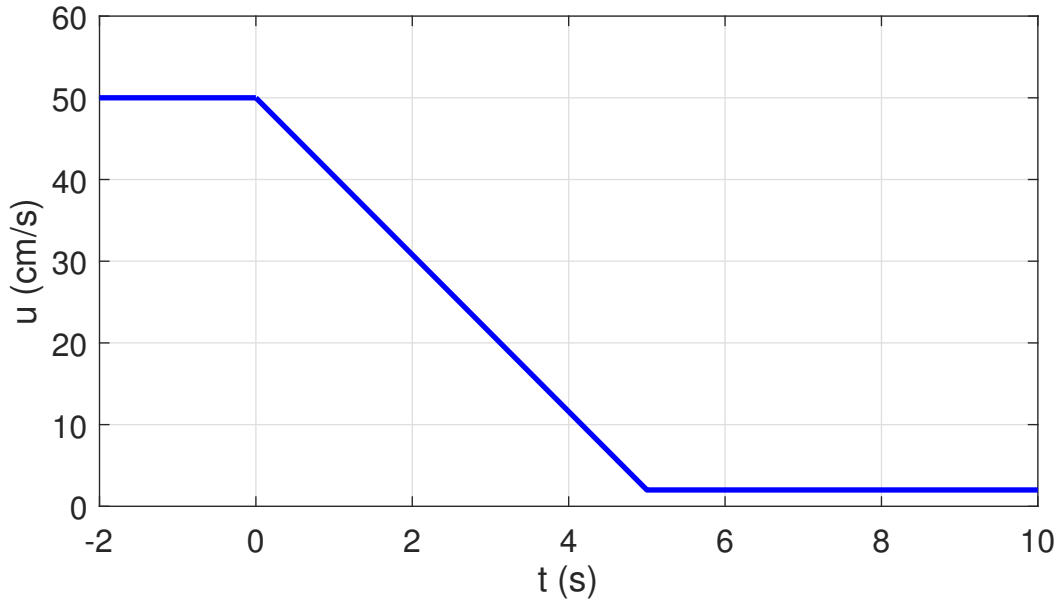


Figura 2.5: Variação linear da velocidade, com $u_0 = 50$ cm/s, $u_f = 2$ cm/s e $T_p = 5$ s.

Existem duas situações diferentes que ocorrem dependendo do valor de T_p . A distância percorrida, dentro da tubulação, pelo precursor durante o transiente da bomba pode ser maior ou menor que o comprimento L . Chamando essa distância de Δx_p , ela pode ser calculada pela equação de Torricelli:

$$\begin{aligned} u_f^2 &= u_0^2 + 2\alpha\Delta x_p, \\ \Delta x_p &= \frac{u_f + u_0}{2}T_p. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Assim, há dois casos que devem ser tratados de forma diferente para calcular o tempo de trânsito $\tau(t)$:

$$\Delta x_p = \frac{u_f + u_0}{2}T_p \leq L, \quad (2.21)$$

e que podem ser escritos em termos de T_p como:

$$T_p \leq T_{crit} \equiv \frac{2\tau_f\tau_0}{\tau_f + \tau_0}, \quad (2.22)$$

onde T_{crit} é o tempo crítico de transiente da bomba na qual ocorre essa separação.

Em ambos os casos, $\tau(t) = \tau_0$ para instantes $t < 0$. Também em ambos os casos acontece o primeiro cenário, mostrado na figura 2.6, para $0 \leq t < T_1$. Os precursores percorrem uma distância Δx_1 dentro da tubulação com a velocidade inicial u_0 e uma distância Δx_2 com movimento acelerado durante o transiente da bomba, e reentram no reator antes do fim do transiente.

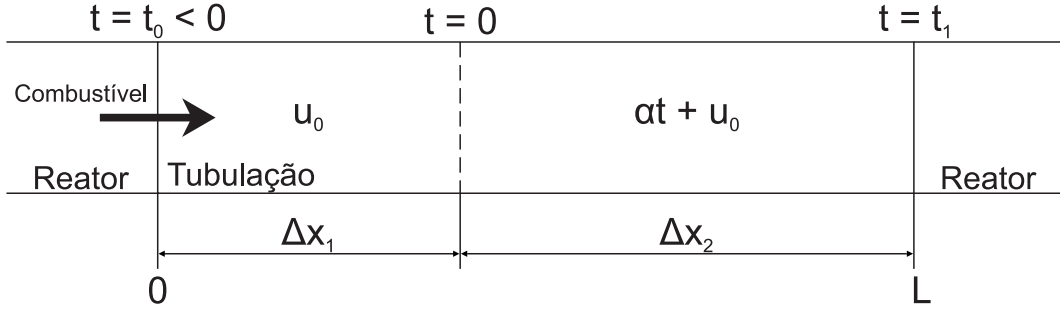


Figura 2.6: Situação onde o precursor percorre parte da tubulação com velocidade constante u_0 e parte acelerando com α .

As expressões para Δx_1 e Δx_2 são:

$$\Delta x_1 = u_0(0 - t_0) = -u_0 t_0, \quad (2.23a)$$

$$\Delta x_2 = u_0(t_1 - 0) + \frac{\alpha}{2}(t_1 - 0)^2. \quad (2.23b)$$

Sabendo que $\Delta x_1 + \Delta x_2 = L$ e que $\tau = t_1 - t_0$, temos, usando a equação (2.19):

$$u_0\tau + \frac{\alpha}{2}t_1^2 = L, \quad (2.24)$$

$$\tau = \tau_0 - \frac{\alpha}{2u_0}t_1^2 = \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{t_1^2}{2T_p},$$

e, novamente, substituindo t_1 por t :

$$\tau(t) = \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{t^2}{2T_p} + \tau_0, \quad \text{se } 0 \leq t < T_1. \quad (2.25)$$

No próximo cenário aparecem as diferenças entre os casos das condições (2.21) e (2.22). Se $T_p < T_{crit}$, os precursores percorrem parte da tubulação com velocidade

constante u_0 , parte com aceleração, e o restante com velocidade constante u_f . Se $T_p > T_{crit}$, os precursores percorrerão a tubulação inteira com movimento uniformemente acelerado. A figura 2.7 ilustra essas duas situações.

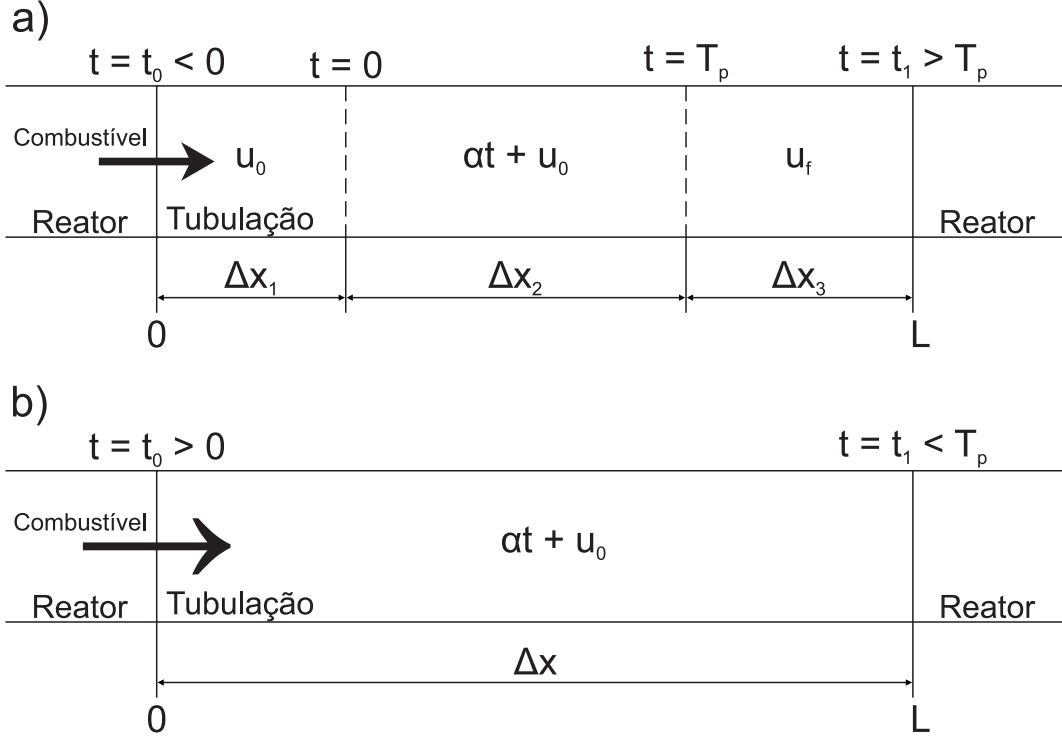


Figura 2.7: Situação onde o precursor: a) percorre parte da tubulação com velocidade constante u_0 , parte acelerando com α e o restante com velocidade u_f ($T_p < T_{crit}$); b) percorre toda a tubulação acelerando ($T_p > T_{crit}$).

Na situação a) da figura 2.7, temos:

$$\Delta x_1 = -u_0 t_0, \quad (2.26a)$$

$$\Delta x_2 = \Delta x_p = \frac{u_f + u_0}{2} T_p, \quad (2.26b)$$

$$\Delta x_3 = u_f (t_1 - T_p). \quad (2.26c)$$

Assim:

$$L = -u_0 t_0 + \frac{u_f + u_0}{2} T_p + u_f (t_1 - T_p) = u_0 \tau + (u_f - u_0) t_1 + \frac{u_0 - u_f}{2} T_p, \quad (2.27)$$

$$\tau = \tau_0 + \frac{u_0 - u_f}{u_0} t_1 - \frac{u_0 - u_f}{u_0} \frac{T_p}{2} = \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \left(t_1 - \frac{T_p}{2} \right),$$

e substituindo t_1 por t :

$$\tau(t) = \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \left(t - \frac{T_p}{2} \right), \quad \text{se } T_1 \leq t < T_2 \text{ e } T_p < T_{crit}. \quad (2.28)$$

Na situação b) da figura 2.7, usando novamente a equação (2.19), temos:

$$\begin{aligned}\Delta x &= (\alpha t_0 + u_0)(t_1 - t_0) + \frac{\alpha}{2}(t_1 - t_0)^2 = L, \\ \frac{1}{2}\tau^2 - \left(t_1 + \frac{u_0}{\alpha}\right)\tau + \frac{L}{\alpha} &= 0, \\ \tau &= t_1 + \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} \left\{ T_p - \left[2 \frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} (t_1 - \tau_0) T_p + \left(\frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} t_1 \right)^2 + T_p^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}.\end{aligned}\tag{2.29}$$

Substituindo t_1 por t :

$$\begin{aligned}\tau(t) &= t + \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} \left\{ T_p - \left[2 \frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} (t - \tau_0) T_p + \left(\frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} t \right)^2 + T_p^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, \\ &\text{se } T_1 \leq t < T_2 \text{ e } T_p > T_{crit}.\end{aligned}\tag{2.30}$$

O cenário seguinte é igual para ambas condições sobre T_p . O precursor entra na tubulação após o início do transiente da bomba ($t_0 > 0$), percorre parte dela com movimento acelerado e o restante com velocidade constante u_f . A figura 2.8 ilustra essa situação.

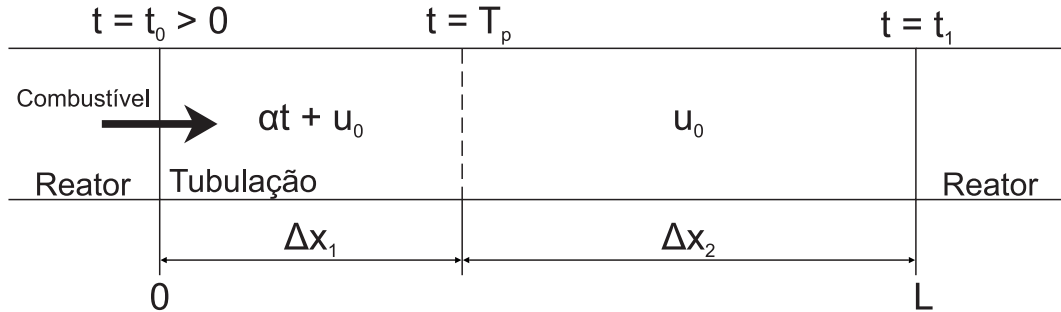


Figura 2.8: Situação onde o precursor percorre parte da tubulação acelerando e parte com velocidade constante.

Neste caso, as expressões para Δx_1 e Δx_2 são:

$$\Delta x_1 = (\alpha t_0 + u_0)(T_p - t_0) + \frac{\alpha}{2}(T_p - t_0)^2,\tag{2.31a}$$

$$\Delta x_2 = u_f(t_1 - T_p).\tag{2.31b}$$

Substituindo $t_0 = t_1 - \tau$ em $\Delta x_1 + \Delta x_2 = L$ e usando a equação (2.19):

$$\begin{aligned}
& (\alpha t_1 - \alpha \tau + u_0)(T_p - t_1 + \tau) + \frac{\alpha}{2}(T_p - t_1 + \tau)^2 + u_f(t_1 - T_p) = L, \\
& \frac{1}{2}\tau^2 - \left(t_1 + \frac{u_0}{\alpha}\right)\tau + \frac{1}{2}(t_1 - T_p)^2 + \frac{L}{\alpha} = 0,
\end{aligned} \tag{2.32}$$

$$\tau = t_1 + \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} \left\{ T_p - \left[\frac{2\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p^2 + 2 \frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} (t_1 - \tau_f) \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p \right]^{\frac{1}{2}} \right\}.$$

Novamente substituindo t_1 por t :

$$\begin{aligned}
\tau(t) = t + \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} \left\{ T_p - \left[\frac{2\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p^2 + 2 \frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} (t - \tau_f) \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, \\
\text{se } T_2 \leq t < T_3.
\end{aligned} \tag{2.33}$$

Com as expressões para $\tau(t)$ calculadas, é necessário agora encontrar os limites T_1, T_2 e T_3 dos intervalos na qual cada expressão é válida. O instante T_1 pode ser obtido analisando a fronteira entre as situações mostradas nas figuras 2.6 e 2.7. Para o caso de $T_p < T_{crit}$ isso ocorre quando $t_1 = T_1$ e $\Delta x_3 = 0$, logo $T_1 = T_p$. Já para o caso de $T_p > T_{crit}$, isso ocorre quando os precursores entram na tubulação no instante em que o transiente da bomba inicia, ou seja, $t_0 = 0$. Assim:

$$\begin{aligned}
& u_0 T_1 + \frac{\alpha}{2} T_1^2 = L, \\
& \frac{1}{2} T_1^2 + \frac{u_0}{\alpha} T_1 - \frac{L}{\alpha} = 0, \\
& T_1 = \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} T_p \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} \frac{2\tau_0}{T_p}} \right], \quad \text{se } T_p > T_{crit}.
\end{aligned} \tag{2.34}$$

Para o caso em que $T_p < T_{crit}$, o instante T_2 ocorre quando $\Delta x_1 = 0$ na figura 2.7:

$$\begin{aligned}
& \frac{u_f + u_0}{2} T_p + u_f(T_2 - T_p) = L, \\
& u_f T_2 + \frac{u_0 - u_f}{2} T_p = L, \\
& T_2 = \tau_f + \frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_0} \frac{T_p}{2}, \quad \text{se } T_p < T_{crit}.
\end{aligned} \tag{2.35}$$

No caso de $T_p > T_{crit}$, pode-se ver pela figura 2.8 que T_2 é o instante em que Δx_2 é nulo e $t_1 = T_2$, ou seja:

$$\begin{aligned}
& \Delta x_2 = u_f(T_2 - T_p) = 0, \\
& T_2 = T_p, \quad \text{se } T_p > T_{crit}.
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Para calcular T_3 , faz-se $t_0 = T_p$, ou seja, os precursores saem do reator (instante t_0) logo após o fim do transiente da bomba, com velocidade final constante igual a u_f . Este caso vale para ambas condições sobre T_p . Pela figura 2.8, isso significa que $\Delta x_1 = 0$, logo:

$$\begin{aligned}\Delta x_2 &= u_f(T_3 - T_p) = L, \\ T_3 &= T_p + \tau_f.\end{aligned}\tag{2.37}$$

Finalmente, podemos escrever a expressão final para o tempo de trânsito $\tau(t)$. Se $T_p < T_{crit}$:

$$\tau(t) = \begin{cases} \tau_0, & \text{se } t < 0, \\ \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{t^2}{2T_p} + \tau_0, & \text{se } 0 \leq t < T_p, \\ \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \left(t - \frac{T_p}{2} \right), & \text{se } T_p \leq t < T_a, \\ t + \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} \left\{ T_p - \left[\frac{2\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p^2 + 2\frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} (t - \tau_f) \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, & \text{se } T_a \leq t < \tau_f + T_p, \\ \tau_f, & \text{se } t \geq \tau_f + T_p, \end{cases}\tag{2.38}$$

No caso em que $T_p > T_{crit}$:

$$\tau(t) = \begin{cases} \tau_0, & \text{se } t < 0, \\ \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{t^2}{2T_p} + \tau_0, & \text{se } 0 \leq t < T_b, \\ t + \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} \left\{ T_p - \left[\left(\frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} t \right)^2 + 2\frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} (t - \tau_0) T_p + T_p^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, & \text{se } T_b \leq t < T_p, \\ t + \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} \left\{ T_p - \left[\frac{2\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p^2 + 2\frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} (t - \tau_f) \frac{\tau_0}{\tau_f} T_p \right]^{\frac{1}{2}} \right\}, & \text{se } T_p \leq t < \tau_f + T_p, \\ \tau_f, & \text{se } t \geq \tau_f + T_p. \end{cases}\tag{2.39}$$

Os valores de T_a e T_b , presentes nos intervalos das expressões, são dados por:

$$T_a \equiv \tau_f + \frac{\tau_0 - \tau_f T_p}{\tau_0} \frac{T_p}{2}, \quad (2.40a)$$

$$T_b \equiv \frac{\tau_f}{\tau_0 - \tau_f} T_p \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{\tau_0 - \tau_f}{\tau_f} \frac{2\tau_0}{T_p}} \right]. \quad (2.40b)$$

A figura 2.9 mostra três gráficos de $\tau(t)$ para diferentes tempos de transiente da bomba T_p . Nos casos em que T_p seja igual a T_{crit} , pode-se usar qualquer uma das duas expressões de $\tau(t)$.

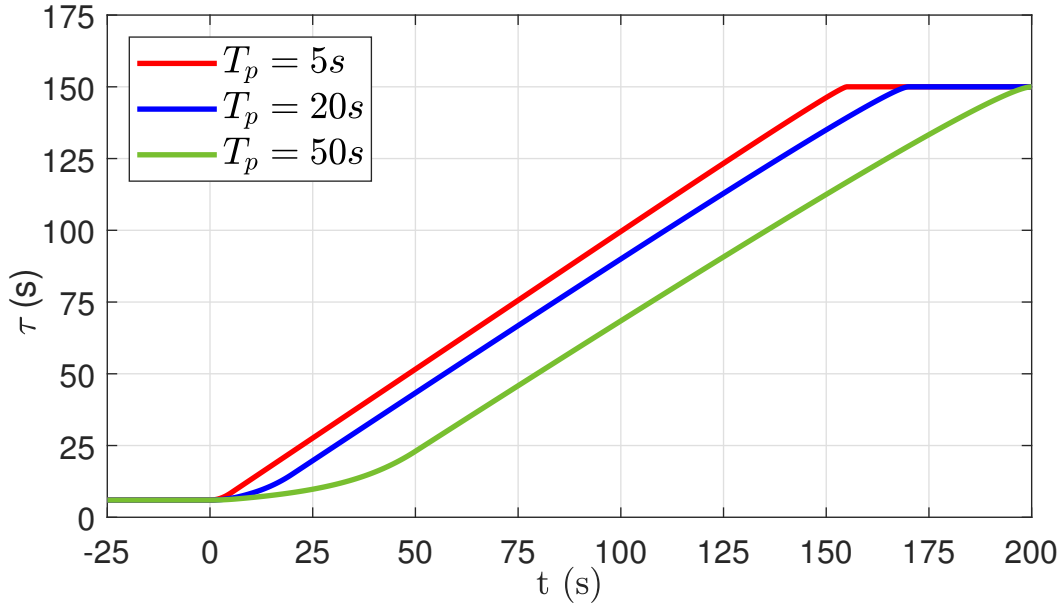


Figura 2.9: Variação do tempo de trânsito para variação linear da velocidade, com $u_0 = 50$ cm/s, $u_f = 2$ cm/s, $L = 300$ cm e $T_{crit} = 11.538$.

2.2.3 Variação Exponencial

Para uma variação exponencial da velocidade de escoamento, a velocidade decai com uma constante de decaimento κ da bomba. Este caso é útil para modelar a variação da velocidade em casos de parada de bomba (a velocidade não chega a zero pois há circulação natural). A expressão pra velocidade fica:

$$u(t) = \begin{cases} u_0, & \text{se } t < 0, \\ (u_0 - u_f)e^{-\kappa t} + u_f, & \text{se } t \geq 0. \end{cases} \quad (2.41)$$

A figura 2.10 mostra o gráfico da velocidade variando exponencialmente.

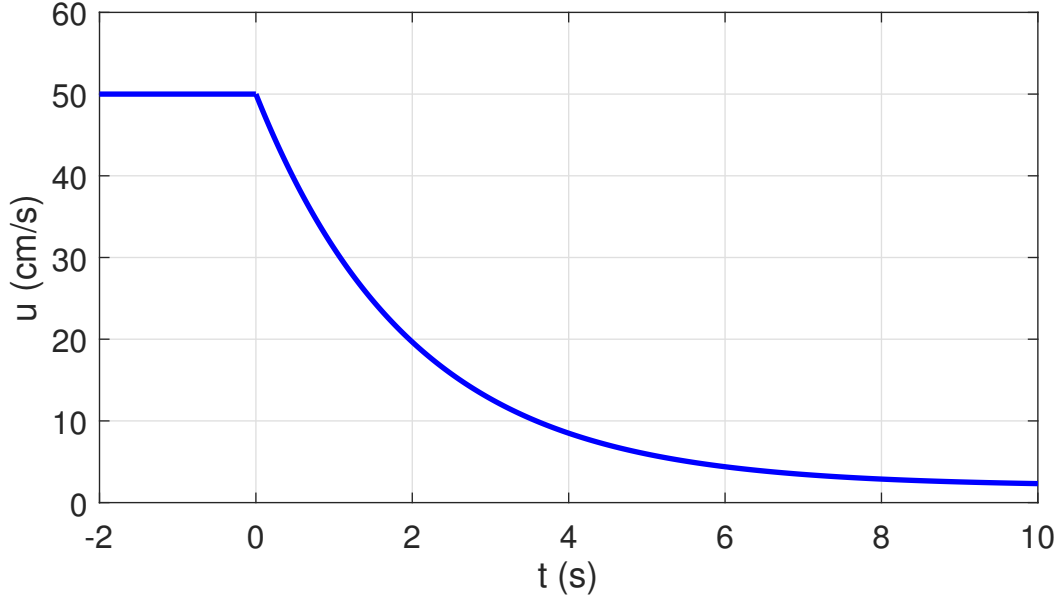


Figura 2.10: Variação exponencial da velocidade, com $u_0 = 50$ cm/s, $u_f = 2$ cm/s e $\kappa = 0.5$ s⁻¹.

No início do transiente, os precursores que saíram do reator no instante $t_0 < 0$ e retornaram no instante $t_1 > 0$ percorreram parte da tubulação com velocidade inicial constante u_0 e parte com a velocidade variando exponencialmente, como ilustrado na figura 2.11. As distâncias Δx_1 e Δx_2 são dadas por:

$$\Delta x_1 = -u_0(0 - t_0) = -u_0 t_0, \quad (2.42a)$$

$$\Delta x_2 = \int_0^{t_1} [(u_0 - u_f)e^{-\kappa t'} + u_f] dt' = -\frac{u_0 - u_f}{\kappa} [e^{-\kappa t_1} - 1] + u_f t_1. \quad (2.42b)$$

Sabendo que $\Delta x_1 + \Delta x_2 = L$ e que $t_0 = t_1 - \tau$, temos:

$$\begin{aligned} -u_0 t_1 + u_0 \tau + \frac{u_f - u_0}{\kappa} [e^{-\kappa t_1} - 1] + u_f t_1 &= L, \\ u_0 \tau &= L + (u_0 - u_f)t_1 - \frac{u_0 - u_f}{\kappa} [e^{-\kappa t_1} - 1], \\ \tau &= \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \left[t_1 + \frac{e^{-\kappa t_1} - 1}{\kappa} \right]. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Substituindo t_1 por t , obtém-se a primeira parte da expressão para $\tau(t)$:

$$\tau(t) = \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \left[t + \frac{e^{-\kappa t} - 1}{\kappa} \right], \quad \text{se } 0 \leq t < T. \quad (2.44)$$

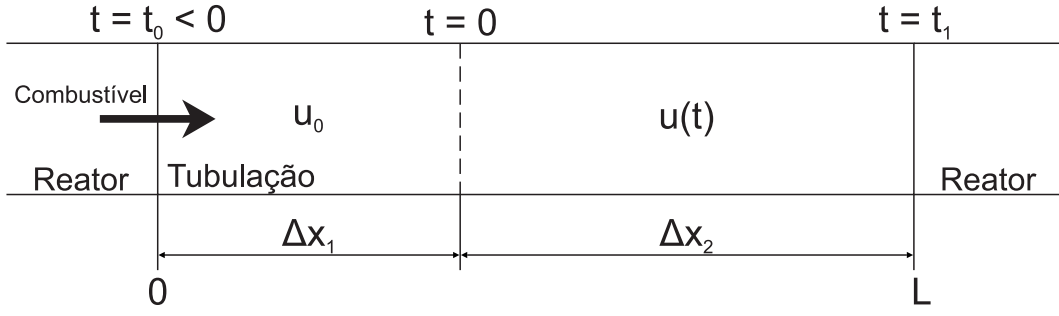


Figura 2.11: Situação onde o precursor percorre parte da tubulação com velocidade constante u_0 e parte com velocidade variando exponencialmente.

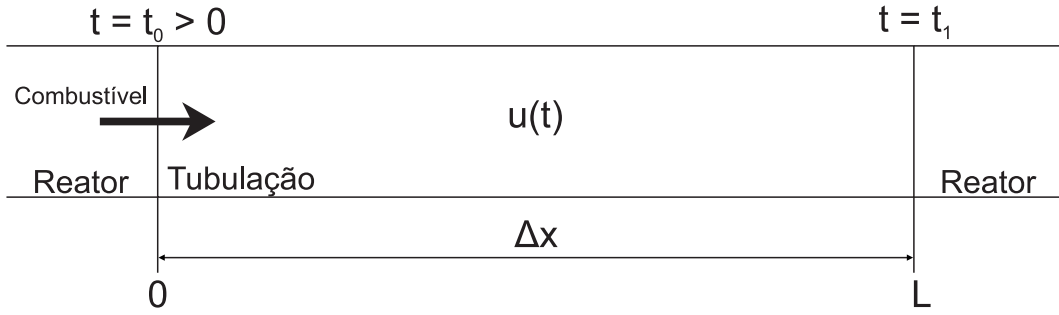


Figura 2.12: Situação onde o precursor percorre toda a tubulação com velocidade variando exponencialmente.

Para instantes mais longos, os precursores percorrem toda a tubulação com a velocidade variando, como mostrado na figura 2.12. Assim:

$$\Delta x = \int_{t_0}^{t_1} u(t') dt' = L. \quad (2.45)$$

Fazendo a mudança de variáveis para $s = t' - t_1$, temos:

$$L = \int_{-\tau}^0 u(s + t_1) ds = -\frac{u_0 - u_f}{\kappa} [1 - e^{\kappa\tau}] e^{-\kappa t_1} + u_f \tau, \quad (2.46)$$

$$\tau + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t_1}}{\kappa} e^{\kappa\tau} = \tau_f + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t_1}}{\kappa}.$$

Essa expressão pode ser resolvida em termos da função W de Lambert (apêndice A):

$$\tau = \tau_f + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t_1}}{\kappa} - \frac{1}{\kappa} W_0 \left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp \left[\kappa(\tau_f - t_1) + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} e^{-\kappa t_1} \right] \right), \quad (2.47)$$

e substituindo t_1 por t , obtemos a segunda parte da expressão de $\tau(t)$:

$$\tau(t) = \tau_f + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t}}{\kappa} - \frac{1}{\kappa} \text{W}_0 \left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp \left[\kappa(\tau_f - t) + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} e^{-\kappa t} \right] \right), \quad \text{se } T \leq t. \quad (2.48)$$

Para calcular o instante T na qual a expressão (2.44) deixa de valer e passa para a expressão (2.48), basta avaliarmos o instante t_0 em 0, na figura 2.12, e o instante t_1 será igual a T . Assim, temos:

$$\begin{aligned} L &= \int_0^T u(t') dt' = -\frac{u_0 - u_f}{\kappa} [e^{-\kappa T} - 1] + u_f T, \\ u_f T - \frac{u_0 - u_f}{\kappa} e^{-\kappa T} &= L - \frac{u_0 - u_f}{\kappa}, \\ T - \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa T}}{\kappa} &= \tau_f - \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{1}{\kappa}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Novamente, resolvendo para T em termos da função W de Lambert:

$$T = \tau_f - \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{1}{\kappa} + \frac{1}{\kappa} \text{W}_0 \left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp \left[\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} - \kappa \tau_f \right] \right). \quad (2.50)$$

Assim, a expressão para o tempo de trânsito $\tau(t)$ para variação exponencial da velocidade, é dada por:

$$\tau(t) = \begin{cases} \tau_0, & \text{se } t < 0, \\ \tau_0 + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_f} \left[t + \frac{e^{-\kappa t} - 1}{\kappa} \right], & \text{se } 0 \leq t < T, \\ \tau_f + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t}}{\kappa} - \frac{1}{\kappa} \text{W}_0 \left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp \left[\kappa(\tau_f - t) + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} e^{-\kappa t} \right] \right), & \text{se } t \geq T. \end{cases} \quad (2.51)$$

A figura 2.13 mostra o gráfico de $\tau(t)$ para três valores diferentes da constante de decaimento da bomba κ . Na figura 2.14 são apresentadas algumas das curvas de $\tau(t)$ mostradas até aqui (figuras 2.4, 2.9 e 2.13), para compará-las. Pode-se notar que quanto menor for o tempo de transiente da bomba, T_p , ou quanto maior for a constante de decaimento da bomba, a variação do tempo de trânsito tende à calculada para o caso de variação instantânea da velocidade de escoamento. A figura 2.15 mostra o mesmo que a figura 2.14, mas com velocidades inicial e final diferentes.

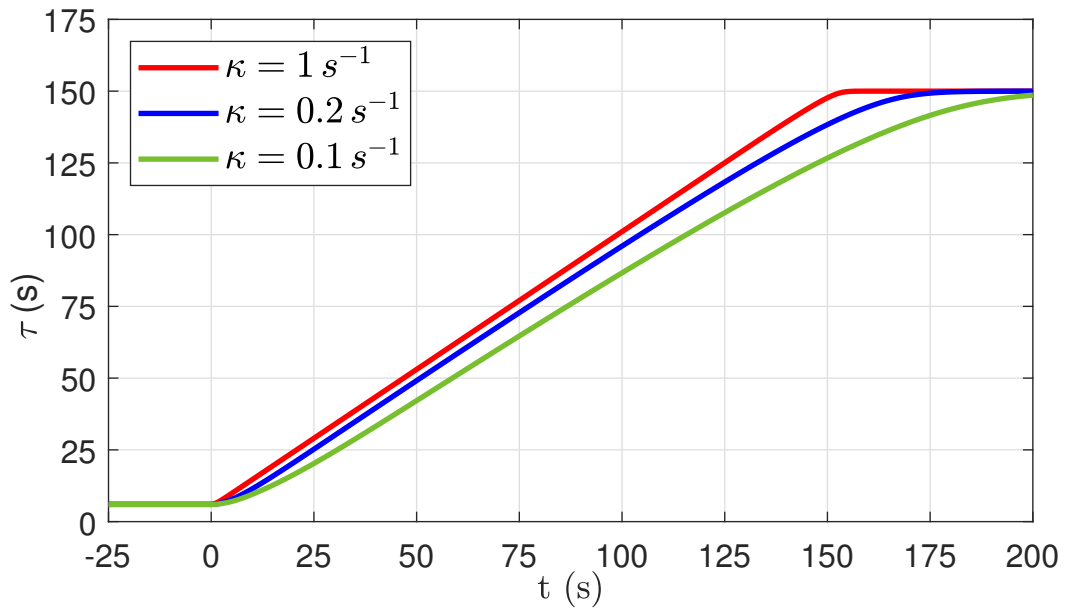


Figura 2.13: Variação do tempo de trânsito para variação exponencial da velocidade, com $u_0 = 50 \text{ cm/s}$, $u_f = 2 \text{ cm/s}$ e $L = 300 \text{ cm}$.

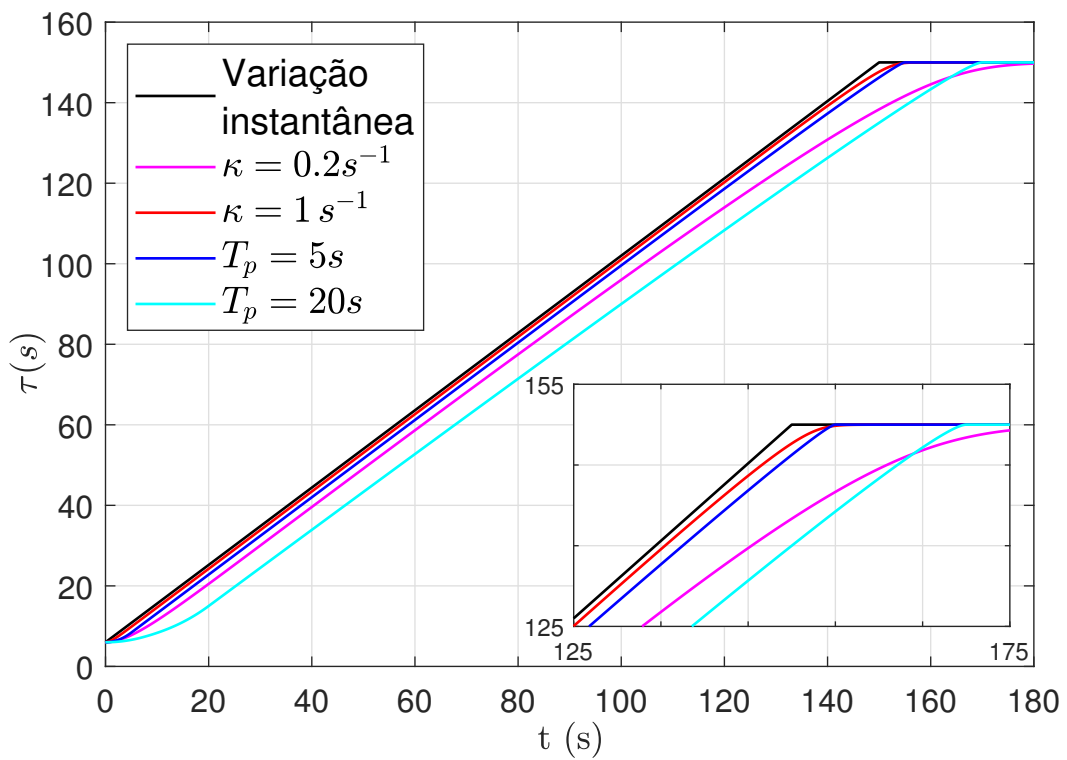


Figura 2.14: Variação do tempo de trânsito para variações instantânea, linear e exponencial da velocidade, com $u_0 = 50 \text{ cm/s}$, $u_f = 2 \text{ cm/s}$ e $L = 300 \text{ cm}$.

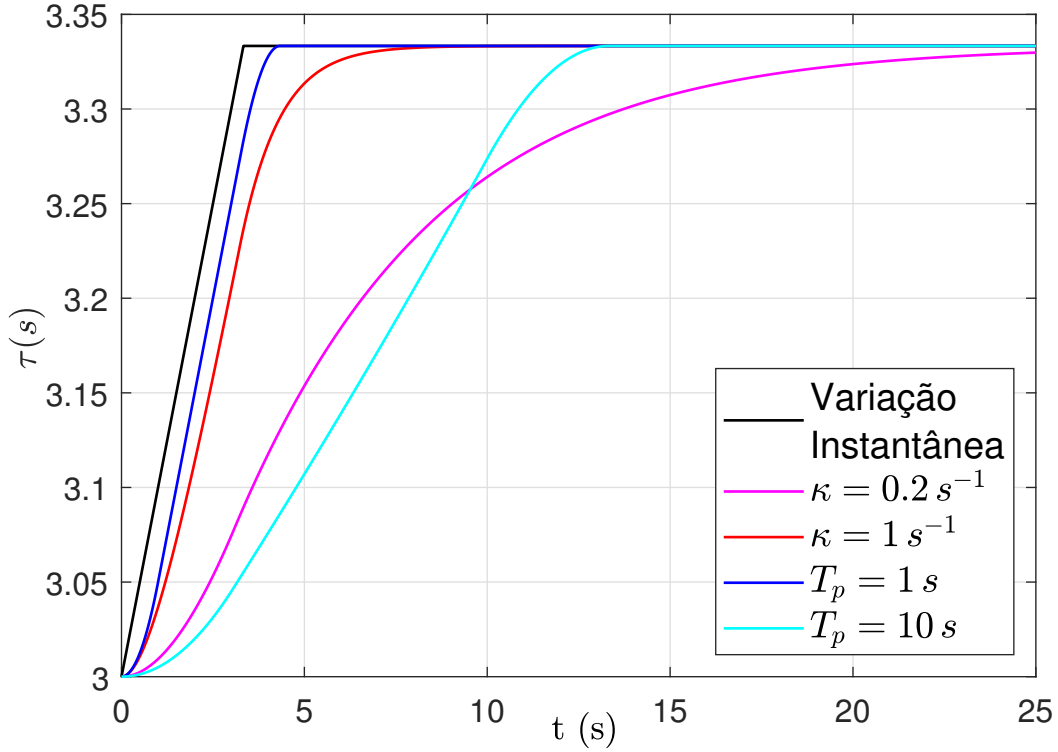


Figura 2.15: Variação do tempo de trânsito para variações instantânea, linear e exponencial da velocidade, com $u_0 = 100$ cm/s, $u_f = 90$ cm/s e $L = 300$ cm.

2.2.4 Método Numérico Para Variação Genérica da Velocidade de Escoamento

Quando não possuímos a forma analítica da variação temporal da velocidade de escoamento, não é possível determinar uma forma analítica para o tempo de trânsito, o que também acontece quando a função da velocidade é tal que a integral da equação (2.8) resulte em uma equação sem solução analítica para $\tau(t)$. Nesta subseção, será apresentado um método para o cálculo numérico do tempo de trânsito para uma variação genérica da velocidade de escoamento $u(t)$.

Primeiramente, discretiza-se a variável temporal com passo Δt :

$$t_n \equiv n \Delta t, \quad (2.52)$$

onde $n = 0, 1, \dots, t_f/\Delta t$. Podemos avaliar a equação (2.8) em $t = t_n$ e dividir a integral em duas partes, da seguinte forma:

$$\int_{t_n - \tau_n}^{t_m} u(t') dt' + \int_{t_m}^{t_n} u(t') dt' = L. \quad (2.53)$$

onde $\tau_n \equiv \tau(t_n)$. O índice superior da primeira integral, $t_m = m \Delta t$, é o menor múltiplo do passo temporal Δt que seja maior que o índice inferior $t_n - \tau_n$. A segunda integral da equação (2.53) pode ser definida como Δy e aproximada pelo método dos trapézios:

$$\Delta y \equiv \int_{t_m}^{t_n} u(t') dt' = \sum_{i=1}^{n-m} \Delta y_i, \quad (2.54)$$

onde

$$\Delta y_i \equiv \frac{u_{n+1-i} + u_{n-i}}{2} \Delta t, \quad (2.55)$$

e t_m é tal que Δy deva ser o maior valor possível menor que L .

Para encontrarmos m , devemos calcular cada Δy_i , a partir de $i = 1$, e somá-los até que a soma Δy seja maior que L . Supondo que isso aconteça quando $i = j$, o maior valor possível de Δy acontece em $j - 1$, ou seja:

$$j - 1 = n - m \rightarrow m = n + 1 - j, \quad (2.56)$$

e

$$\Delta y = \sum_{i=1}^{j-1} \Delta y_i. \quad (2.57)$$

Agora, para encontrarmos τ_n , voltamos à equação (2.53):

$$\int_{t_n - \tau_n}^{t_{n+1-j}} u(t') dt' = L - \Delta y. \quad (2.58)$$

Como o intervalo dessa integral é menor que o passo temporal Δt , podemos aproximar $u(t')$ pela velocidade média no intervalo entre t_{n-j} e t_{n+1-j} , no qual a integral está contida:

$$u(t') \approx \frac{u_{n+1-j} + u_{n-j}}{2}. \quad (2.59)$$

Assim, ao substituir na integral em (2.58), teremos:

$$\left[t_{n+1-j} - t_n + \tau_n \right] \frac{u_{n+1-j} + u_{n-j}}{2} = L - \Delta y. \quad (2.60)$$

Lembrando que $t_n = n \Delta t$, a equação fica:

$$(1 - j)\Delta t + \tau_n = \frac{2(L - \Delta y)}{u_{n+1-j} + u_{n-j}}, \quad (2.61)$$

e resolvendo para τ_n :

$$\tau_n = (j - 1)\Delta t + \frac{2(L - \Delta y)}{u_{n+1-j} + u_{n-j}}. \quad (2.62)$$

A separação em duas integrais na equação (2.53) foi necessária pois, caso não fosse feita, o valor de τ_n seria dado em múltiplos de Δt . Ao resolver a integral da equação (2.58), interpolamos a velocidade de escoamento no intervalo em que a integral da equação (2.8) deixa de ser menor e passa a ser maior que L , obtendo assim um valor de τ_n mais preciso, mesmo tendo sido usada uma aproximação simples para $u(t')$.

Deve-se ressaltar que nos casos em que j for tal que o índice da velocidade de escoamento fique negativo, deve-se usar o valor de u_0 para a velocidade, visto que para $t < 0$, o sistema estava estacionário e com velocidade constante igual a u_0 .

Para verificar a aplicabilidade do método numérico proposto para o cálculo de $\tau(t)$, será comparada a solução numérica, τ_{num} , com as soluções analíticas tanto para o caso de variação linear da velocidade, τ_{lin} , quanto para variação exponencial, τ_{exp} . A grandeza a ser analisada será o erro relativo máximo, definido por:

$$\text{Erro Relativo Máximo} \equiv \max \left(\frac{|\tau_{num}(t) - \tau_i(t)|}{\tau_i(t)} \right) \times 100\%, \quad (2.63)$$

onde τ_i representa τ_{lin} e τ_{exp} . As tabelas 2.1, 2.2, 2.3 e 2.4 apresentam os resultados.

Tabela 2.1: Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação exponencial da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.001$ s.

u_0 (cm/s)	κ (s ⁻¹)	Velocidade final (assintótica) u_f		
		$0.8u_0$	$0.5u_0$	$0.1u_0$
1	0.1	2.9×10^{-10}	8.2×10^{-10}	1.7×10^{-9}
	0.5	2.7×10^{-9}	6.8×10^{-9}	1.4×10^{-8}
	5	1.4×10^{-7}	1.5×10^{-7}	1.4×10^{-7}
10	0.1	3.4×10^{-9}	8.3×10^{-9}	1.4×10^{-8}
	0.5	2.6×10^{-8}	6.2×10^{-8}	1.1×10^{-7}
	5	2.8×10^{-7}	6.8×10^{-7}	1.4×10^{-6}
100	0.1	9.6×10^{-8}	2.7×10^{-7}	3.9×10^{-7}
	0.5	5.8×10^{-7}	1.2×10^{-6}	6.8×10^{-7}
	5	5.5×10^{-6}	9.0×10^{-6}	1.1×10^{-5}

Tabela 2.2: Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação exponencial da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.1$ s.

u_0 (cm/s)	κ (s ⁻¹)	Velocidade final (assintótica) u_f		
		$0.8u_0$	$0.5u_0$	$0.1u_0$
1	0.1	3.5×10^{-6}	8.8×10^{-6}	1.8×10^{-5}
	0.5	2.8×10^{-5}	6.8×10^{-5}	1.4×10^{-4}
	5	1.3×10^{-3}	1.4×10^{-3}	1.4×10^{-3}
10	0.1	3.5×10^{-5}	8.3×10^{-5}	1.4×10^{-4}
	0.5	2.6×10^{-4}	6.2×10^{-4}	1.2×10^{-3}
	5	1.3×10^{-2}	1.4×10^{-2}	1.4×10^{-2}
100	0.1	8.6×10^{-4}	3.2×10^{-3}	4.1×10^{-3}
	0.5	6.2×10^{-3}	1.1×10^{-2}	7.0×10^{-3}
	5	3.1×10^{-2}	7.7×10^{-2}	1.1×10^{-1}

Tabela 2.3: Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação linear da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.001$ s.

u_0 (cm/s)	T_p (s)	Velocidade final u_f		
		$2u_0$	$5u_0$	$10u_0$
1	1	7.2×10^{-11}	7.6×10^{-11}	1.3×10^{-10}
	5	7.1×10^{-11}	1.1×10^{-10}	4.6×10^{-10}
	10	6.0×10^{-11}	8.1×10^{-11}	3.3×10^{-10}
10	1	8.0×10^{-7}	7.2×10^{-6}	2.9×10^{-5}
	5	1.6×10^{-7}	1.2×10^{-6}	3.8×10^{-6}
	10	7.1×10^{-8}	4.9×10^{-7}	1.6×10^{-6}
50	1	7.0×10^{-6}	4.7×10^{-5}	1.4×10^{-4}
	5	1.1×10^{-6}	5.6×10^{-6}	1.7×10^{-5}
	10	4.8×10^{-7}	2.4×10^{-6}	6.6×10^{-6}

Tabela 2.4: Erro relativo máximo, em %, entre o tempo de trânsito numérico e o analítico, para variação linear da velocidade e com passo temporal $\Delta t = 0.1$ s.

u_0 (cm/s)	T_p (s)	Velocidade final u_f		
		$2u_0$	$5u_0$	$10u_0$
1	1	8.3×10^{-7}	8.9×10^{-7}	2.2×10^{-6}
	5	8.2×10^{-7}	2.3×10^{-6}	4.9×10^{-6}
	10	5.8×10^{-7}	8.2×10^{-7}	2.3×10^{-6}
10	1	6.0×10^{-3}	2.3×10^{-2}	1.1×10^{-1}
	5	1.4×10^{-3}	7.6×10^{-3}	2.2×10^{-2}
	10	6.7×10^{-4}	4.3×10^{-3}	1.2×10^{-2}
50	1	5.6×10^{-2}	2.2×10^{-2}	4.5×10^{-1}
	5	1.0×10^{-2}	4.4×10^{-2}	1.4×10^{-2}
	10	4.5×10^{-3}	2.2×10^{-2}	5.2×10^{-2}

A partir das tabelas 2.1 e 2.2, podemos notar que o erro aumenta com o quadrado do passo temporal Δt , além de ser maior quanto menor for a velocidade final assintótica u_f e maior for a velocidade inicial u_0 . Conforme a constante temporal κ da bomba aumenta, o erro também aumenta, ou seja, o método possui menor precisão quanto mais rápido for a variação da velocidade de escoamento. Em todos os casos, a ordem de grandeza do erro é da ordem de décimos de por cento ou menor, garantindo, assim, uma boa precisão para o método numérico, mesmo quando o passo temporal é relativamente grande, como no caso de $\Delta t = 0.1$ s.

Pelas tabelas 2.3 e 2.4, vemos que o comportamento para o caso de variação linear é similar ao do caso exponencial: o erro aumenta com o quadrado do passo temporal, além de ser maior conforme a velocidade inicial e sua diferença em relação à final aumentam. Vemos também que o erro diminui conforme o tempo T_p de transiente da bomba aumenta: quanto mais lento for o transiente, maior a precisão do método, da mesma forma que no caso exponencial. O maior erro visto, neste caso, também foi da ordem de décimos de por cento, ou seja, o método numérico determina com boa precisão o tempo de trânsito $\tau(t)$ para os dois casos tratados.

Capítulo 3

Solução do Sistema Estacionário e Aproximações

As equações do sistema estacionário, dadas pelas equações (2.4a) e (2.4b), podem ser resolvidas semi-analiticamente se considerarmos apenas nêutrons monoenergéticos e uma família de precursores. Esse caso, apesar de muito simplificado, é útil para se analisar alguns comportamentos do combustível fluido que não aparecem no sólido. Alguns casos limites também podem ser verificados, como as aproximações de velocidade de escoamento infinita e sem recirculação dos precursores pelo reator.

3.1 Solução semi-analítica para um caso simples

As equações (2.4a) e (2.4b) no caso de nêutrons monoenergéticos e uma família de precursores simplificam-se para:

$$-D \frac{d^2\phi}{dz^2} + \Sigma_a\phi - \lambda C = \frac{1}{k}(1 - \beta)\nu\Sigma_f\phi, \quad (3.1a)$$

$$u \frac{dC}{dz} + \lambda C = \frac{1}{k}\beta\nu\Sigma_f\phi, \quad (3.1b)$$

onde o termo k é o fator de multiplicação efetivo e foi incluído nos termos de fissão para encontrar a condição de criticalidade. O índice 0, que indicava os parâmetros avaliados no estado estacionário, e o índice *eff*, do fator de multiplicação efetivo k_{eff} , foram removidos para simplificar as notações.

Isolando o precursor na equação (3.1a) e substituindo na equação (3.1b),

obtém-se a seguinte equação para o fluxo apenas:

$$\frac{d^3\phi}{dz^3} + \frac{\lambda}{u} \frac{d^2\phi}{dz^2} + B^2(k) \frac{d\phi}{dz} + \frac{\lambda}{u} B_m^2(k) \phi = 0, \quad (3.2)$$

onde os parâmetros $B_m^2(k)$ e $B^2(k)$ são dados por

$$B_m^2(k) \equiv \frac{\nu\Sigma_f/k - \Sigma_a}{D}, \quad (3.3a)$$

$$B^2(k) \equiv \frac{(1 - \beta)\nu\Sigma_f/k - \Sigma_a}{D}, \quad (3.3b)$$

com B_m e B dados pelas respectivas raízes positivas.

O parâmetro $B_m(k)$ é equivalente ao *buckling* material de um reator a combustível sólido que possua os mesmos parâmetros nucleares. Além disso, na equação (3.2), pode-se ver que multiplicando os dois lados pela velocidade u e tomando o limite $u \rightarrow 0$, a equação para o caso de combustível sólido é recuperada:

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} + B_m^2(k)\phi = 0. \quad (3.4)$$

A condição de contorno dos precursores pode ser transformada em uma condição para o fluxo usando a equação (3.1a). Reescrevendo a equação de forma a isolar a concentração de precursores $C(z)$, temos:

$$C(z) = \frac{D}{\lambda} \left[\frac{d^2\phi}{dz^2} + B^2\phi(z) \right]. \quad (3.5)$$

Avaliando em $z = 0$ e $z = H$, e levando em consideração a condição de contorno de vácuo para o fluxo, obtemos assim as condições de contorno para a equação (3.2):

$$\phi(0) = 0 = \phi(H), \quad (3.6a)$$

$$\left. \frac{d^2\phi}{dz^2} \right|_{z=0} = \xi \left. \frac{d^2\phi}{dz^2} \right|_{z=H}, \quad (3.6b)$$

onde $\xi = e^{-\lambda\tau}$. Assumindo uma forma exponencial para o fluxo (e^{rz}), ao substituir na equação (3.2) obtemos a sua equação característica:

$$r^3 + \frac{\lambda}{u} r^2 + B^2(k)r + \frac{\lambda}{u} B_m^2(k) = 0. \quad (3.7)$$

As raízes r_1, r_2 e r_3 estão em função de k e podem ser determinadas analiticamente, pela fórmula de Cardano-Tartaglia [40], ou numericamente. O fluxo, então, é dado por

$$\phi(z) = A_1 e^{r_1 z} + A_2 e^{r_2 z} + A_3 e^{r_3 z}. \quad (3.8)$$

Aplicando as condições de contorno, chega-se a um sistema envolvendo os coeficientes A_1, A_2, A_3 e o fator de multiplicação k , também chamado de autovalor:

$$A_1 + A_2 + A_3 = 0, \quad (3.9a)$$

$$A_1 e^{r_1 H} + A_2 e^{r_2 H} + A_3 e^{r_3 H} = 0, \quad (3.9b)$$

$$r_1^2 A_1 (1 - e^{r_1 H \xi}) + r_2^2 A_2 (1 - e^{r_2 H \xi}) + r_3^2 A_3 (1 - e^{r_3 H \xi}) = 0. \quad (3.9c)$$

Esse sistema pode ser escrito na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ e^{r_1 H} & e^{r_2 H} & e^{r_3 H} \\ r_1^2 (1 - e^{r_1 H \xi}) & r_2^2 (1 - e^{r_2 H \xi}) & r_3^2 (1 - e^{r_3 H \xi}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3.10)$$

Para que os coeficientes não sejam todos nulos, o determinante da matriz deve ser nulo, resultando, assim, na seguinte condição para o autovalor k :

$$f(k) = 0, \quad (3.11)$$

sendo

$$\begin{aligned} f(k) \equiv & r_1^2 (1 - e^{r_1 H \xi}) (e^{r_3 H} - e^{r_2 H}) + r_2^2 (1 - e^{r_2 H \xi}) (e^{r_1 H} - e^{r_3 H}) \\ & + r_3^2 (1 - e^{r_3 H \xi}) (e^{r_2 H} - e^{r_1 H}). \end{aligned} \quad (3.12)$$

As raízes dessa função são calculadas numericamente. Pode-se mostrar [14] que a maior raiz está associada a uma solução trivial, sendo então a segunda maior raiz definida como o fator de multiplicação efetivo k_{eff} , que está associado à forma espacial assintótica do fluxo, ou seja, a forma para a qual o fluxo tende no estado estacionário do sistema.

Usando as equações (3.9a) e (3.9b), pode-se escrever os coeficientes A_2 e A_3 em função de A_1 . Substituindo na expressão do fluxo (3.8), obtém-se

$$\phi(z) = \left[(e^{r_2 H} - e^{r_3 H}) e^{r_1 z} + (e^{r_3 H} - e^{r_1 H}) e^{r_2 z} + (e^{r_1 H} - e^{r_2 H}) e^{r_3 z} \right] \frac{A_1}{e^{r_2 H} - e^{r_3 H}}. \quad (3.13)$$

O coeficiente A_1 é determinado pela normalização usada para o fluxo, que usual-

mente é a potência nuclear do sistema

$$P_{ot} = \int_0^H w \Sigma_f \phi(z) dz, \quad (3.14)$$

onde w é a energia média liberada por fissão. O coeficiente A_1 é dado, então, por

$$A_1 = \frac{P_{ot}}{w \Sigma_f} \left[e^{r_2 H} - e^{r_3 H} \right] A, \quad (3.15)$$

onde

$$A \equiv \left\{ \frac{1}{r_1} (e^{r_2 H} - e^{r_3 H}) (e^{r_1 H} - 1) + \frac{1}{r_2} (e^{r_3 H} - e^{r_1 H}) (e^{r_2 H} - 1) + \frac{1}{r_3} (e^{r_1 H} - e^{r_2 H}) (e^{r_3 H} - 1) \right\}^{-1}. \quad (3.16)$$

Dessa forma, a expressão para o fluxo de nêutrons fica:

$$\phi(z) = \frac{P_{ot}}{w \Sigma_f} A \left[(e^{r_2 H} - e^{r_3 H}) e^{r_1 z} + (e^{r_3 H} - e^{r_1 H}) e^{r_2 z} + (e^{r_1 H} - e^{r_2 H}) e^{r_3 z} \right]. \quad (3.17)$$

Substituindo o fluxo na equação (3.1a), obtém-se a expressão para a concentração de precursores:

$$C(z) = \frac{P_{ot} D}{\lambda w \Sigma_f} A \left[(e^{r_3 H} - e^{r_2 H}) (r_1^2 + B^2) e^{r_1 z} + (e^{r_1 H} - e^{r_3 H}) (r_2^2 + B^2) e^{r_2 z} + (e^{r_2 H} - e^{r_1 H}) (r_3^2 + B^2) e^{r_3 z} \right]. \quad (3.18)$$

As equações do sistema estacionário, (3.1a) e (3.1b), possuem dois casos limites de interesse que serão vistos na próxima seção: a aproximação de velocidade infinita e a de não-recirculação dos precursores.

3.2 Casos limites do sistema estacionário

3.2.1 Aproximação de Velocidade Infinita

Antes de fazer a aproximação de velocidade infinita, precisamos escrever a concentração de precursores em termos do fluxo de nêutrons, resolvendo a equação diferencial (3.1b) pelo método do fator integrante:

$$\frac{d}{dz} \left[C(z) \exp\left(\lambda \frac{z}{u}\right) \right] = \frac{\nu \Sigma_f \beta}{k} \frac{\beta}{u} \phi(z) \exp\left(\lambda \frac{z}{u}\right). \quad (3.19)$$

Integrando ambos os lados entre 0 e z , obtemos

$$C(z) \exp\left(\lambda \frac{z}{u}\right) - C(0) = \frac{\nu \Sigma_f \beta}{k} \frac{\beta}{u} \int_0^z \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz', \quad (3.20)$$

e substituindo a condição de contorno para $C(0)$ (Eq. (2.5b)):

$$C(z) \exp\left(\lambda \frac{z}{u}\right) - C(H) \exp\left(-\lambda \frac{L}{u}\right) = \frac{\nu \Sigma_f \beta}{k} \frac{\beta}{u} \int_0^z \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz'. \quad (3.21)$$

Para encontrar $C(H)$, basta avaliarmos essa equação em $z = H$:

$$C(H) \left[\exp\left(\lambda \frac{H}{u}\right) - \exp\left(-\lambda \frac{L}{u}\right) \right] = \frac{\nu \Sigma_f \beta}{k} \frac{\beta}{u} \int_0^H \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz'. \quad (3.22)$$

e isolando $C(H)$, obtemos a expressão para a concentração de precursores na saída do reator:

$$C(H) = \frac{1}{\exp\left(\lambda \frac{H}{u}\right) - \exp\left(-\lambda \frac{L}{u}\right)} \frac{\nu \Sigma_f \beta}{k} \frac{\beta}{u} \int_0^H \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz'. \quad (3.23)$$

Substituindo, então, na equação (3.21) e fatorando os termos, temos:

$$C(z) \exp\left(\lambda \frac{z}{u}\right) = \frac{\nu \Sigma_f \beta}{k} \frac{\beta}{u} \left\{ \frac{\exp(-\lambda L/u)}{\exp(\lambda H/u) - \exp(-\lambda L/u)} \int_0^H \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz' + \int_0^z \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz' \right\}. \quad (3.24)$$

Multiplicando por $\exp(\lambda L/u)$ o numerador e o denominador da fração do primeiro termo, e isolando $C(z)$, finalmente obtemos a expressão para a concentração de precursores:

$$C(z) = \frac{\nu \Sigma_f \beta}{k} \frac{\beta}{u} \left\{ \left[\exp\left(\lambda \frac{L+H}{u}\right) - 1 \right]^{-1} \int_0^H \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz' + \int_0^z \phi(z') \exp\left(\lambda \frac{z'}{u}\right) dz' \right\} \exp\left(-\lambda \frac{z}{u}\right). \quad (3.25)$$

Podemos fazer uma análise física dessa expressão. O termo $[\exp(\lambda(L+H)/u)-1]^{-1}$ pode ser expandido em uma série geométrica e escrito como:

$$\frac{1}{\exp\left(\lambda\frac{L+H}{u}\right)-1} = \frac{\exp\left(-\lambda\frac{L+H}{u}\right)}{1-\exp\left(-\lambda\frac{L+H}{u}\right)} = \sum_{i=1}^{\infty} \exp\left(-i\lambda\frac{L+H}{u}\right), \quad (3.26)$$

que substituído na equação (3.25) nos dá:

$$C(z) = \frac{\nu\Sigma_f}{k} \frac{\beta}{u} \left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \int_0^H \phi(z') \exp\left(\lambda\frac{z'}{u} - i\lambda\tau_t\right) dz' + \int_0^z \phi(z') \exp\left(\lambda\frac{z'}{u}\right) dz' \right\} \exp\left(-\lambda\frac{z}{u}\right), \quad (3.27)$$

onde $\tau_t \equiv (L+H)/u$ é o tempo total que os precursores demoram para circular todo o sistema. Com isso, pode-se interpretar fisicamente cada integral da expressão de $C(z)$: a segunda integral está relacionada com os precursores gerados na atual circulação do combustível entre a entrada do reator e o ponto z , enquanto que a primeira integral está relacionada com os precursores gerados em todas as circulações prévias pelo sistema [10].

Voltando para a aproximação de velocidade de escoamento infinita, ao tomarmos o limite $u \rightarrow \infty$ na equação (3.25), podemos aproximar as exponenciais $\exp(\lambda z'/u)$ e $\exp(-\lambda z/u)$ para 1, enquanto que $\exp(\lambda(L+H)/u)$ aproximamos pela sua expansão de Taylor em primeira ordem (para evitar uma divisão por 0):

$$\exp\left(\lambda\frac{L+H}{u}\right) \approx 1 + \lambda\frac{L+H}{u}. \quad (3.28)$$

Substituindo essas aproximações na equação (3.27), temos:

$$C(z) = \frac{\beta\nu\Sigma_f}{k} \left\{ \frac{1}{\lambda(L+H)} \int_0^H \phi(z') dz' + \frac{1}{u} \int_0^z \phi(z') dz' \right\}. \quad (3.29)$$

Desprezando o segundo termo da equação por estar dividido pela velocidade, obtemos a expressão para a concentração de precursores quando $u \rightarrow \infty$

$$C(z) = C_0 \equiv \frac{\beta\nu\Sigma_f}{\lambda(L+H)k} \int_0^H \phi(z') dz', \quad (3.30)$$

sendo importante ressaltar que C_0 não depende da posição axial z . Isso acontece

pois quando os precursores são produzidos após a fissão, rapidamente o escoamento do combustível homogeneiza sua concentração, tornando-a uniforme.

Com a expressão de C_0 calculada, podemos substituí-la na equação do fluxo (3.1a), obtendo:

$$\frac{d^2\phi}{dz^2} + B^2\phi = -\frac{\lambda}{D}C_0. \quad (3.31)$$

A solução dessa equação é obtida combinando as soluções homogênea e particular. Elas são dadas por

$$\phi_h = A_1 \cos(Bz) + A_2 \sin(Bz), \quad (3.32a)$$

$$\phi_p = -\frac{\lambda C_0}{DB^2}. \quad (3.32b)$$

Os coeficientes A_1 e A_2 podem ser obtidos pelas condições de contorno:

$$\phi(0) = 0 \rightarrow A_1 - \frac{\lambda C_0}{DB^2} = 0 \rightarrow A_1 = \frac{\lambda C_0}{DB^2}, \quad (3.33a)$$

$$\phi(H) = 0 \rightarrow \frac{\lambda C_0}{DB^2}(\cos(BH) - 1) + A_2 \sin(BH) = 0 \rightarrow A_2 = \frac{1 - \cos(BH)}{\sin(BH)} \frac{\lambda C_0}{DB^2}. \quad (3.33b)$$

Com isso, a expressão para o fluxo de nêutrons fica:

$$\phi(z) = \frac{\lambda C_0}{DB^2} \left[\cos(Bz) + \frac{1 - \cos(BH)}{\sin(BH)} \sin(Bz) - 1 \right]. \quad (3.34)$$

A amplitude do fluxo de nêutrons dependerá da normalização de ϕ , dada pela potência do reator (3.14). Substituindo a expressão de C_0 (Eq. (3.30)), usando essa normalização, na expressão do fluxo de nêutrons, obtemos:

$$\phi(z) = \frac{\beta \nu \Sigma_f}{DB^2(L + H)k} \frac{P_{ot}}{\omega \Sigma_f} \left[\cos(Bz) + \frac{1 - \cos(BH)}{\sin(BH)} \sin(Bz) - 1 \right]. \quad (3.35)$$

O termo da seção de choque macroscópica de fissão, Σ_f , não se cancela pois geralmente considera-se que $\nu \Sigma_f$ e $\omega \Sigma_f$ são parâmetros diferentes.

Na fórmula do fluxo, dada pela equação (3.35), todos os parâmetros são dados do reator, exceto pelo fator de multiplicação k (e conseqüentemente $B(k)$), que é calculado pela condição de criticalidade, determinada pela terceira condição de contorno, que no caso é a condição para a reentrada dos precursores. No entanto, como na expressão para C_0 essa condição de contorno já foi aplicada, essa expressão

pode ser usada para determinar a condição de criticalidade. Assim, podemos substituir a expressão de $\phi(z)$ na expressão (3.30) de C_0 [11], e integrando explicitamente $\phi(z')$ entre 0 e H , obtemos

$$\frac{\lambda(L+H)k}{\beta\nu\Sigma_f}C_0 = \frac{\lambda C_0}{DB^2} \left[\frac{\sin(BH)}{B} + \frac{1-\cos(BH)}{\sin(BH)} \frac{1-\cos(BH)}{B} - H \right], \quad (3.36)$$

ou ainda, após algebrismos,

$$B \sin(BH) \left[H + B^2 \frac{D(L+H)k}{\beta\nu\Sigma_f} \right] = 2 \left[1 - \cos(BH) \right]. \quad (3.37)$$

Agora, multiplicando a equação por $\beta\nu\Sigma_f/(Dk)$ e expandindo o termo $B^2(L+H)$:

$$B \sin(BH) \left[\frac{\beta\nu\Sigma_f}{Dk} H + B^2 H + B^2 L \right] = 2 \frac{\beta\nu\Sigma_f}{Dk} \left[1 - \cos(BH) \right], \quad (3.38)$$

e substituindo B^2 pela sua definição (3.3a) no termo $B^2 H$, temos

$$B \sin(BH) \left[\frac{\nu\Sigma_f/k - \Sigma_a}{D} H + B^2 L \right] = 2 \frac{\beta\nu\Sigma_f}{Dk} \left[1 - \cos(BH) \right]. \quad (3.39)$$

Podemos identificar o termo $(\nu\Sigma_f/k - \Sigma_a)/D$ como a definição de B_m^2 (Eq. (3.3b)), simplificando a equação para

$$2 \frac{\beta\nu\Sigma_f}{Dk} \left[1 - \cos(B(k)H) \right] - B(k) \sin(B(k)H) \left[B_m^2(k)H + B^2(k)L \right] = 0, \quad (3.40)$$

e lembrando que tanto B^2 e B_m^2 são funções de k . A partir dessa equação transcendental, o valor de k pode ser calculado numericamente, sendo o fator de multiplicação efetivo k_{eff} definido como a maior solução dessa equação.

3.2.2 Aproximação de Não-Recirculação dos Precursores

A aproximação de não-recirculação dos precursores implica em considerar que o tempo de trânsito na tubulação tende a infinito e, conseqüentemente, todos os precursores que saem do reator decaem antes de reentrar nele. Ou seja:

$$\tau \rightarrow \infty, \quad (3.41a)$$

$$\xi = \exp\left(-\lambda \frac{L}{u}\right) \approx 0. \quad (3.41b)$$

Relembrando a condição de contorno para os precursores na entrada do reator,

$$C(0) = C(H) \exp\left(-\lambda \frac{L}{u}\right), \quad (3.42)$$

podemos ver que essa aproximação é válida quando a constante de decaimento dos precursores λ é alta, quando a velocidade de escoamento u é baixa, quando o comprimento da tubulação L é grande, ou de forma mais realística, quando a combinação desses três parâmetros tornam o termo $\lambda L/u$ relativamente grande. Por exemplo, quando $\lambda L/u = 7$, menos de 1% dos precursores retornam ao reator sem terem decaído.

Como a aproximação ocorre apenas na condição de contorno para os precursores, o desenvolvimento da solução é similar ao caso sem aproximação, alterando apenas a condição de criticalidade. Partindo da equação característica (3.7)

$$r^3 + \frac{\lambda}{u}r^2 + B^2(k)r + \frac{\lambda}{u}B_m^2(k) = 0, \quad (3.43)$$

podemos, conforme já mencionado, calcular analiticamente as suas raízes. Fazendo a substituição $r = s - \lambda/(3u)$, obtemos

$$s^3 + ps + q = 0, \quad (3.44)$$

onde os coeficientes p e q são definidos como

$$p \equiv B^2 - \frac{\lambda}{3u}, \quad (3.45a)$$

$$q \equiv \frac{2\lambda^3}{27u^3} + \frac{\lambda}{u} \left(B_m^2 - \frac{B^2}{3} \right). \quad (3.45b)$$

O discriminante dessa equação cúbica é dado por [40]

$$\Delta = \frac{p^3}{27} + \frac{q^2}{4}, \quad (3.46)$$

que, quando substituídos os valores de p e q , torna-se

$$\Delta = \frac{B^6}{27} - \frac{\lambda^2}{108u^2}B^4 - \frac{\lambda^2}{6u^2}B_m^2B^2 + \frac{\lambda^4}{27u^4}B_m^2 + \frac{\lambda^2}{4u^2}B_m^4. \quad (3.47)$$

Relembrando as definições de B^2 e B_m^2 (dadas pelas equações (3.3a) e (3.3b)), podemos escrever B_m^2 em função de B^2 :

$$B_m^2 = B^2 + \gamma, \quad (3.48)$$

onde

$$\gamma = \frac{\beta\nu\Sigma_f/k}{D}. \quad (3.49)$$

Ao substituir essa expressão de B_m^2 no discriminante, obtemos a seguinte forma de Δ [10]:

$$\Delta = \frac{B^6}{27} + \frac{2\lambda^2}{27u^2}B^4 + \frac{\lambda^4}{27u^4}B^2 + \frac{\lambda^2}{u^2}B^2\gamma + \frac{\lambda^2}{4u^2}\gamma^2 + \frac{\lambda^4}{27u^4}\gamma. \quad (3.50)$$

Esta forma é útil pois, como todos os parâmetros são positivos, podemos concluir que o discriminante Δ será sempre positivo. Dessa forma, sabemos que a equação cúbica possuirá uma raiz real e duas raízes complexas conjugadas [40]. Essas raízes serão dadas por:

$$s_{1,2} = -\frac{x+y}{2} \pm (x-y)\frac{i\sqrt{3}}{2}, \quad (3.51a)$$

$$s_3 = x+y, \quad (3.51b)$$

onde

$$x = \left[-\frac{q}{2} + \sqrt{\Delta} \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (3.52a)$$

$$y = \left[-\frac{q}{2} - \sqrt{\Delta} \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (3.52b)$$

e voltando à variável r , podemos finalmente escrever as raízes como

$$r_{1,2} = v \pm iw, \quad (3.53a)$$

$$r_3 = x+y - \frac{\lambda}{3u}, \quad (3.53b)$$

onde

$$v = -\frac{x+y}{2} - \frac{\lambda}{3u}, \quad (3.54a)$$

$$w = (x-y)\frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (3.54b)$$

A separação das raízes complexas nas suas partes reais e imaginárias é importante para simplificar a expressão da solução para o fluxo. Com isso, temos:

$$\phi(z) = e^{vz} \left[A_1 \cos(wz) + A_2 \sin(wz) \right] + A_3 e^{r_3 z}. \quad (3.55)$$

Ao aplicarmos as condições de contorno $\phi(0) = 0 = \phi(H)$, podemos eliminar dois dos coeficientes, escrevendo-os em função do terceiro. Assim:

$$\phi(0) = 0 \rightarrow A_3 = -A_1, \quad (3.56a)$$

$$\phi(H) = 0 \rightarrow A_2 = \frac{\exp(r_3 H) - \exp(vH) \cos(wH)}{\sin(wH)} A_1. \quad (3.56b)$$

A terceira condição de contorno, usando a aproximação $\exp(-\lambda L/u) \approx 0$ na equação (3.6b), torna-se:

$$\left. \frac{d^2 \phi}{dz^2} \right|_{z=0} \approx 0. \quad (3.57)$$

Ao derivarmos duas vezes a expressão do fluxo (3.55), temos:

$$\frac{d^2 \phi}{dz^2} = (v^2 - w^2)\phi(z) + 2vwe^{vz} \left[A_2 \cos(wz) - A_1 \sin(wz) \right] + (r_3^2 + w^2 - v^2)A_3 e^{r_3 z}. \quad (3.58)$$

Avaliando em $z = 0$ e substituindo as expressões de A_2 e A_3 , obtemos a condição de criticalidade

$$v^2 - w^2 - r_3^2 + 2vw \frac{\exp(r_3 H) - \exp(vH) \cos(wH)}{\sin(wH)} = 0, \quad (3.59)$$

lembrando que as variáveis v , w e r_3 estão todas em função do fator de multiplicação k , e que a maior solução dessa equação é definida como o fator de multiplicação efetivo k_{eff} . A partir dessa equação, também podemos simplificar a expressão de A_2

$$A_2 = \frac{\exp(r_3 H) - \exp(vH) \cos(wH)}{\sin(wH)} A_1 = \frac{r_3^2 + w^2 - v^2}{2vw} A_1. \quad (3.60)$$

A condição de criticalidade também poderia ser obtida aplicando a aproximação $\xi \equiv \exp(-\lambda L/u) \approx 0$ na condição $f(k) = 0$ da seção 3.1, com $f(k)$ dado por

$$f(k) = r_1^2 \left(e^{r_3 H} - e^{r_2 H} \right) + r_2^2 \left(e^{r_1 H} - e^{r_3 H} \right) + r_3^2 \left(e^{r_2 H} - e^{r_1 H} \right), \quad (3.61)$$

e que se reduz à equação (3.59) com as devidas substituições e manipulações algébricas. A expressão final para o fluxo fica, então

$$\phi(z) = A_1 \left\{ e^{vz} \left[\cos(wz) + \frac{r_3^2 + w^2 - v^2}{2vw} \sin(wz) \right] - e^{r_3 z} \right\}, \quad (3.62)$$

enquanto que para a concentração de precursores temos

$$C(z) = \frac{D}{\lambda} A_1 \left\{ \left[\frac{(r_3^2 - v^2 + w^2)(B^2 + v^2 - w^2)}{2vw} - 2vw \right] e^{vz} \sin(wz) + (r_3^2 + B^2) \left[e^{vz} \cos(wz) - e^{r_3 z} \right] \right\}, \quad (3.63)$$

e com o coeficiente A_1 calculado pela normalização do fluxo (potência do sistema). Pode-se ver que, para $z = 0$, o termo em colchetes fica $[\exp(0) \cos(0) - \exp(0)] = 0$ e no segundo termo, $\exp(0) \sin(0) = 0$, tornando $C(0) = 0$ como era esperado pela aproximação feita.

As expressões para o fluxo dadas pelas equações (3.63) e (3.13) são equivalentes, sendo diferentes apenas pela separação das raízes complexas nas suas partes reais e imaginárias e, conseqüentemente, possuindo coeficientes distintos. O mesmo vale para as expressões da concentração dos precursores.

3.3 Influência da velocidade de escoamento no sistema

Com a solução analítica obtida na seção anterior, podemos analisar como a velocidade de escoamento influencia nas variáveis do sistema: o fluxo de nêutrons, a concentração de precursores e o fator de multiplicação efetivo.

Pelos gráficos das figuras 3.1 e 3.2, podemos ver que a forma espacial do fluxo não é muito afetada pela velocidade, mantendo sempre uma forma parecida com a do caso de combustível sólido (senoide). A concentração de precursores, entretanto, tem a sua forma espacial bastante alterada, partindo de uma forma senoidal, igual à do fluxo para velocidade nula, e se deformando até se tornar uniforme, quando a velocidade tende a infinito. A normalização usada para os fluxos e os precursores foi

$$\int_0^H \phi(z) dz = 1, \quad (3.64)$$

para que fosse possível comparar diretamente as variáveis para diferentes velocidades.

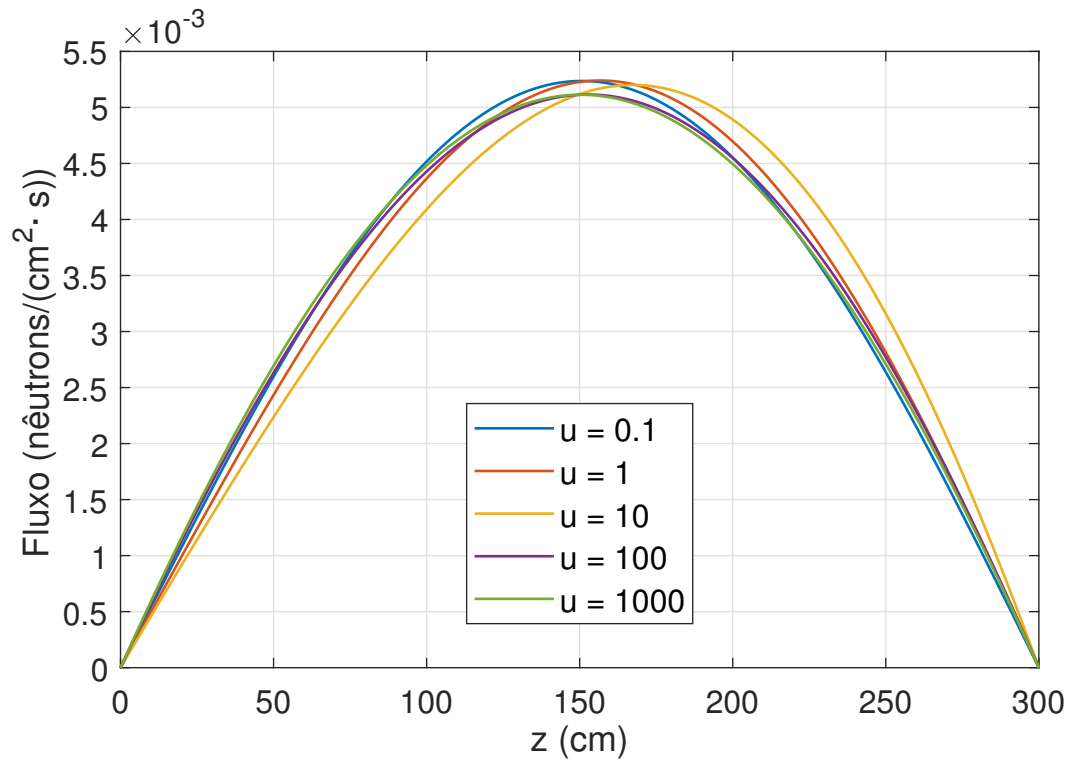


Figura 3.1: Distribuição axial do fluxo de nêutrons para diferentes valores da velocidade de escoamento em cm/s.

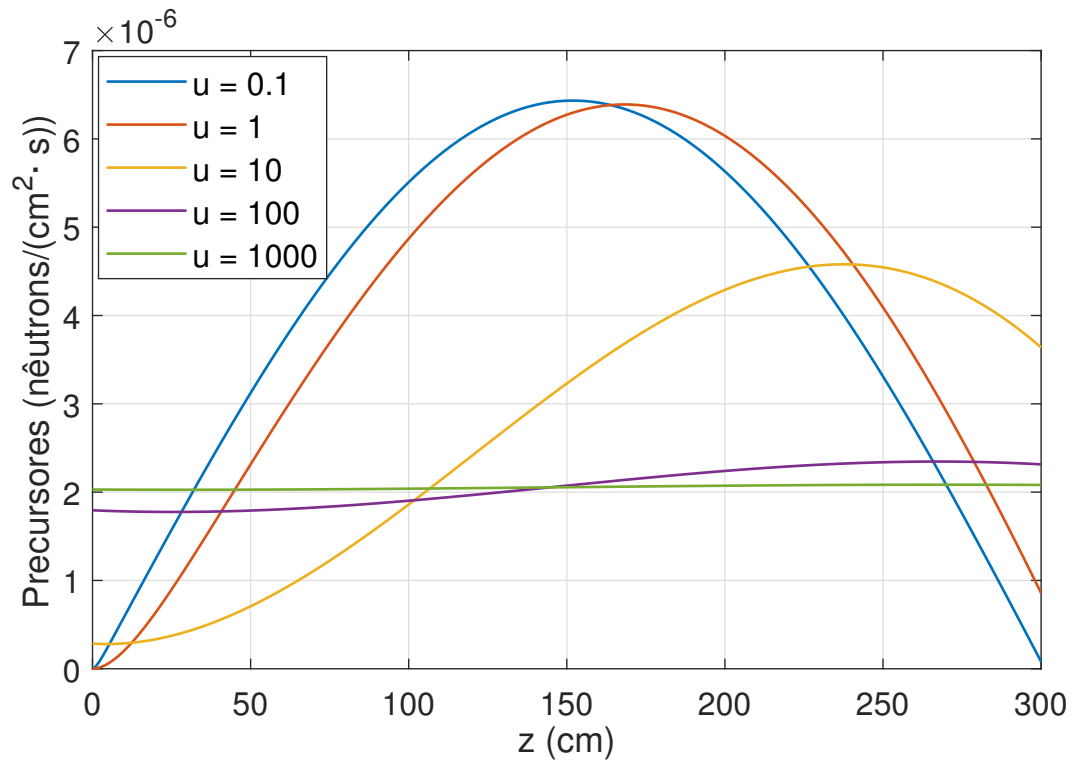


Figura 3.2: Distribuição axial da concentração de precursores para diferentes valores da velocidade de escoamento em cm/s.

A pequena dependência da forma espacial do fluxo com a velocidade de escoamento é devido à equação de difusão não depender explicitamente da velocidade de escoamento, dependendo dela apenas implicitamente pela concentração de precursores. Essa dependência direta não acontece pois a escala de tempo da colisão do nêutron em um núcleo e a subsequente fissão é muito menor que a do escoamento do combustível. No entanto, a escala de tempo entre a fissão e o decaimento de um precursor é bem mais longa, se aproximando da escala do escoamento, e que também dá origem à denominação de “atrasado” aos nêutrons criados pelos precursores.

Para analisarmos a influência da velocidade no fator de multiplicação (k_{eff}), será mais prático usarmos a definição simplificada de reatividade em torno da criticidade ($\rho = 1 - 1/k_{eff}$), servindo como uma mudança de variáveis para uma escala de valores mais práticos de serem analisados. Na figura 3.3 usou-se uma combinação de parâmetros que tornasse o reator crítico quando a velocidade de escoamento fosse nula.

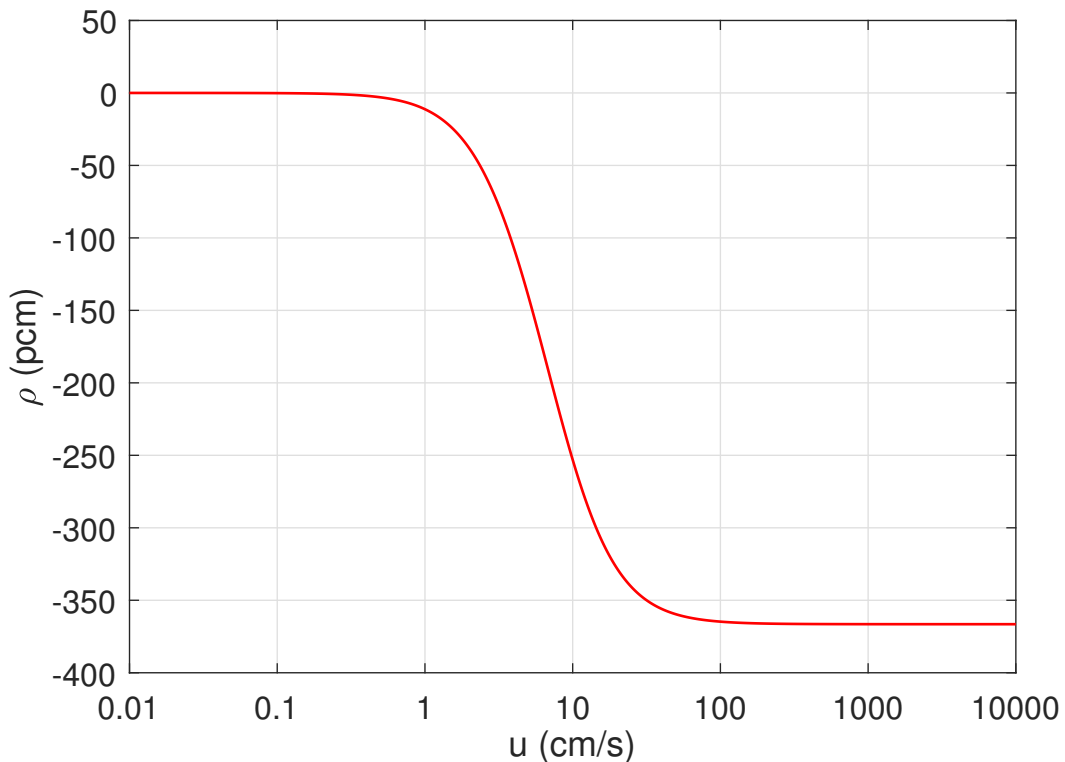


Figura 3.3: Reatividade, ρ , em função da velocidade de escoamento, u , em escala logarítmica para a velocidade.

A partir da figura 3.3, podemos notar que o aumento da velocidade causa uma perda de reatividade no sistema. Isso se explica pelo tempo que os precursores permanecem dentro do núcleo entre seu nascimento após a fissão e sua subsequente saída do reator para a tubulação. Enquanto que para baixas velocidades esse tempo é suficiente para que quase todos eles decaiam dentro do núcleo, gerando nêutrons atrasados que contribuem para as próximas fissões, para velocidades entre 1 e 100 cm/s o tempo de permanência no reator passa pela ordem de grandeza da vida média dos precursores, fazendo com que uma parte maior deles decaia fora do reator e causando assim a queda brusca de reatividade visto na figura 3.3. Acima de 100 cm/s, a perda de reatividade torna-se menos sensível ao aumento da velocidade, pois o tempo total de circulação do combustível passa a ser muito menor que a vida média dos precursores e a concentração tende a se homogeneizar, como visto na figura 3.2. Com isso, podemos identificar as velocidades limites: velocidade nula: $u < 0.1$ cm/s; velocidade infinita: $u > 1000$ cm/s.

No próximo capítulo são deduzidas as equações da cinética pontual, cujos parâmetros dependem diretamente do fluxo e dos precursores, que são obtidos pelas soluções das equações estacionárias vistas neste capítulo.

Capítulo 4

Equações da Cinética Pontual com Atualização dos Precursores

As equações da cinética pontual (ECP) para um reator a combustível líquido podem ser deduzidas a partir das equações da cinética espacial (Eqs. (2.2a) e (2.2a)), junto das equações do sistema estacionário (Eqs. (2.4a) e (2.4b)) e das equações adjuntas (Eqs. (2.6a) e (2.6b)). Esse método de dedução para o modelo de cinética pontual é análogo ao proposto por Henry para reatores com combustível sólido [37]. O modelo resultante é similar ao proposto por Lapenta *et al.* [27], com a diferença da inclusão da atualização da forma espacial dos precursores, que, como será visto mais adiante, é importante para uma melhor aproximação da cinética pontual em relação ao modelo de cinética espacial.

4.1 Dedução das equações da cinética pontual

Começando pelas equações para o fluxo estacionário e o adjunto, multiplicamos a equação (2.2a) de cada grupo g de energia por $\phi_g^*(z)$, integramos em relação a z de 0 até H , e somamos cada equação resultante de $g = 1$ até $g = G$:

$$\begin{aligned} \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^* \frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g}{\partial t} dz &= \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^* \left[D_g \frac{\partial^2 \phi_g}{\partial z^2} + \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_i \right. \\ &\left. + \sum_{g'=1}^G \left\{ \Sigma_{s,g' \rightarrow g} + (1 - \beta) \chi_{p,g} \nu \Sigma_{f,g'} - \Sigma_{t,g} \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'} \right] dz. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Agora fazendo o mesmo para a equação (2.4a), mas multiplicando por $\phi_g(z, t)$ e permutando os índices g e g' nos seus respectivos somatórios duplos, obtemos:

$$\begin{aligned}
0 &= \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g D_g^0 \frac{d^2 \phi_g^*}{dz^2} dz + \sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^I \int_0^H \phi_g \nu \Sigma_{f,g}^0 \beta_i C_i^* dz \\
&+ \sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^* \left\{ \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^0 + (1 - \beta) \chi_{p,g} \nu \Sigma_{f,g'}^0 - \Sigma_{t,g}^0 \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'} dz,
\end{aligned} \tag{4.2}$$

onde o $K_{eff} = 1$ pois assume-se que a configuração inicial estava crítica. Integrando por partes os termos com derivada segunda e depois subtraindo a equação (4.2) da equação (4.1), obtemos a primeira parte das equações da cinética pontual:

$$\begin{aligned}
\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^* \frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g}{\partial t} dz &= \sum_{g=1}^G \int_0^H \left[- \frac{d\phi_g^*}{dz} \Delta D_g \frac{\partial \phi_g}{\partial z} \right. \\
&+ \sum_{g'=1}^G \phi_g^* \left\{ \Delta \Sigma_{s,g' \rightarrow g} + (1 - \beta) \chi_{p,g} \Delta(\nu \Sigma_{f,g'}) - \Delta \Sigma_{t,g} \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'} \\
&+ \left. \sum_{i=1}^I C_i^* \beta_i \Delta(\nu \Sigma_{f,g}) \phi_g - \sum_{i=1}^I C_i^* \beta_i \nu \Sigma_{f,g} \phi_g + \sum_{i=1}^I \phi_g^* \chi_{i,g} \lambda_i C_i \right] dz,
\end{aligned} \tag{4.3}$$

onde o operador Δ é definido como a diferença entre o valor de um parâmetro após o início do transiente e seu valor inicial pré-transiente.

Para as equações dos precursores na cinética pontual, primeiro multiplicamos a equação (2.2b) de cada família i de precursores por $C_i^*(z)$ e integramos entre 0 e H , obtendo

$$\int_0^H C_i^* \frac{\partial C_i}{\partial t} dz = - \int_0^H C_i^* u(t) \frac{\partial C_i}{\partial z} dz - \int_0^H C_i^* \lambda_i C_i dz + \sum_{g=1}^G \int_0^H C_i^* \beta_i \nu \Sigma_{f,g} \phi_g dz. \tag{4.4}$$

O mesmo é feito na equação (2.4b), mas multiplicando por $C_i(z, t)$. Assim

$$0 = \int_0^H C_i u_0 \frac{dC_i^*}{dz} dz - \int_0^H C_i \lambda_i C_i^* dz + \sum_{g=1}^G \int_0^H C_i \lambda_i \chi_{i,g} \phi_g^* dz. \tag{4.5}$$

Integrando por partes, temos

$$\begin{aligned}
\int_0^H C_i^*(z) u(t) \frac{\partial C_i(z, t)}{\partial z} dz &= C_i^*(H) u(t) C_i(H, t) - C_i^*(0) u(t) C_i(0, t) \\
&- \int_0^H C_i(z, t) u(t) \frac{dC_i^*(z)}{dz} dz.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

A derivada do precursor adjunto pode ser escrito em função das variáveis adjuntas, usando a equação (2.22). Agora, subtraindo a equação (4.5) da equação (4.4) e usando a expressão (4.6) e a condição de contorno (2.3c), obtemos a segunda parte das equações da cinética pontual

$$\begin{aligned}
\int_0^H C_i^* \frac{\partial C_i}{\partial t} dz &= \sum_{g=1}^G \int_0^H C_i^* \beta_i \nu \Sigma_{f,g} \phi_g dz - \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^* \chi_{i,g} \lambda_i C_i dz \right. \\
&+ \left. \int_0^H \left\{ \sum_{g=1}^G \chi_{i,g} \phi_g^* - C_i^* \right\} \frac{\Delta u(t)}{u_0} \lambda_i C_i dz + C_i^*(H) u C_i(H, t) \right] \\
&+ C_i^*(0) u(t) \xi_i(t) C_i(H, t - \tau(t)).
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Usar a condição de contorno no último termo dessa equação é importante para aumentar a precisão do modelo, visto que é com isso que se dá origem ao termo atrasado da equação, $C_i(H, t - \tau(t))$, e que modela o fenômeno do escoamento do combustível na cinética pontual de forma mais apropriada [36].

Para obtermos as equações da cinética pontual, precisamos separar o fluxo e os precursores em suas partes espaciais (formas espaciais) e temporais (fatores de amplitude). No entanto, para a forma espacial dos precursores será mantida uma pequena dependência temporal bem mais lenta que seu fator de amplitude. A separação de variáveis, então, fica:

$$\phi_g(z, t) = \phi_g^0(z) P(t), \tag{4.8a}$$

$$C_i(z, t) = \tilde{C}_i(z, t) G_i(t), \tag{4.8b}$$

com as funções $P(t)$ e $G_i(t)$ sendo normalizadas para 1 em $t = 0$, de modo que, no início do transiente, suas respectivas formas espaciais coincidam com as soluções das equações do sistema estacionário. Ou seja:

$$\phi_g(z, 0) = \phi_g^0(z), \tag{4.9a}$$

$$C_i(z, 0) = \tilde{C}_i(z, 0) = C_i^0(z). \tag{4.9b}$$

O fator de amplitude $P(t)$ também pode ser interpretado como uma potência relativa, tomando como base a potência do sistema estacionário.

Para que a forma espacial dos precursores seja definida de forma não ambígua ela deve satisfazer alguma condição de normalização. A normalização a ser usada será a proposta por Pázsit *et al.* [13], pois esta incorpora a maior parte das mudanças na magnitude da concentração de precursores:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \int_0^H C_i^*(z) \tilde{C}_i(z, t) dz &= 0, \\
\therefore \int_0^H C_i^*(z) \tilde{C}_i(z, t) dz &= \int_0^H C_i^*(z) C_i^0(z) dz.
\end{aligned} \tag{4.10}$$

A separação de variáveis usada para a concentração de precursores, na qual

mantém-se uma dependência temporal em sua forma espacial, é a mudança fundamental em relação ao modelo proposto por Lapenta *et al.* [27], na qual a separação dos precursores é feita com uma forma espacial estática, similar à que é usada para o fluxo. Pázsit *et al.* [13] mostra que, ao fazer com que a forma espacial seja igual à distribuição estacionária da concentração de precursores, a condição de contorno para os precursores não pode ser satisfeita, pois a fatorização de uma função com dependência espaço-temporal em funções dependentes do espaço e do tempo de forma separada não é possível para funções que expressem propagações, ou seja, funções do tipo $(z - ut)$, como é o caso dos precursores em um sistema de combustível líquido circulante.

No modelo presentemente proposto, consideramos a forma espacial do fluxo constante, pois sua variação é consideravelmente menor que a da forma espacial dos precursores, devido a essa última possuir uma dependência explícita da velocidade de escoamento na sua equação (Eq. (2.2b)). Assim, é necessário recalculer apenas a forma espacial dos precursores durante o transiente, e isso pode ser feito em intervalos de tempo maiores que os usados para calcular os fatores de amplitude $P(t)$ e $G_i(t)$, já que a escala de tempo do escoamento do combustível é maior que a escala da fissão.

Usando a separação de variáveis das equações (4.8a) e (4.8b) para o fluxo e os precursores, junto com a normalização expressa pela equação (4.10), as equações (4.3) e (4.7) podem ser escritas como

$$\begin{aligned}
& \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \frac{1}{v_g} \phi_g^0(z) dz \right] \frac{dP}{dt} = \left\{ \sum_{g=1}^G \int_0^H \left[- \frac{d\phi_g^*}{dz} \Delta D_g \frac{d\phi_g^0}{dz} \right. \right. \\
& + \sum_{g'=1}^G \phi_g^*(z) \left\{ \Delta \Sigma_{s,g' \rightarrow g} + (1 - \beta) \chi_{p,g} \Delta(\nu \Sigma_{f,g'}) - \Delta \Sigma_{t,g} \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'}^0(z) \\
& + \sum_{i=1}^I C_i^*(z) \beta_i \Delta(\nu \Sigma_{f,g}) \phi_g^0(z) \left. \right] dz - \sum_{i=1}^I \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H C_i^*(z) \beta_i \nu \Sigma_{f,g} \phi_g^0(z) dz \right] \Big\} P(t) \\
& + \sum_{i=1}^I \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} \lambda_i \tilde{C}_i(z, t) dz \right] G_i(t),
\end{aligned} \tag{4.11a}$$

$$\begin{aligned}
& \left[\int_0^H C_i^*(z) \tilde{C}_i(z, t) dz \right] \frac{dG_i}{dt} = \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H C_i^*(z) \beta_i \nu_{\Sigma_{f,g}} \phi_g^0(z) dz \right] P(t) \\
& - \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} \lambda_i \tilde{C}_i(z, t) dz + \int_0^H \left\{ \sum_{g=1}^G \chi_{i,g} \phi_g^*(z) - C_i^*(z) \right\} \frac{\Delta u(t)}{u_0} \lambda_i \tilde{C}_i(z, t) dz \right. \\
& \left. + C_i^*(H) u(t) \tilde{C}_i(H, t) \right] G_i(t) + \left[C_i^*(0) u(t) \xi_i(t) \tilde{C}_i(H, t - \tau(t)) \right] G_i(t - \tau(t)),
\end{aligned} \tag{4.11b}$$

e que podem ser reescritas na forma usual do modelo de cinética pontual:

$$\Lambda(t) \frac{dP(t)}{dt} = \left[\rho(t) - \hat{\beta}(t) \right] P(t) + \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i(t) G_i(t), \tag{4.12a}$$

$$\Lambda_i(t) \frac{dG_i(t)}{dt} = \hat{\beta}_i(t) P(t) - \left[\hat{\lambda}_i(t) + \mu_i(t) + \eta_i(t) \right] G_i(t) + \sigma_i(t) G_i(t - \tau(t)), \tag{4.12b}$$

com parâmetros cinéticos definidos por:

$$\begin{aligned}
\rho(t) \equiv & \frac{1}{F(t)} \sum_{g=1}^G \int_0^H \left\{ - \frac{d\phi_g^*}{dz} \Delta D_g \frac{d\phi_g^0}{dz} + \sum_{i=1}^I C_i^*(z) \beta_i \Delta(\nu_{\Sigma_{f,g}}) \phi_g^0(z) \right. \\
& \left. + \sum_{g'=1}^G \phi_g^*(z) \left[\Delta \Sigma_{s,g' \rightarrow g} + (1 - \beta) \chi_{p,g} \Delta(\nu_{\Sigma_{f,g'}}) - \Delta \Sigma_{t,g} \delta_{gg'} \right] \phi_{g'}^0(z) \right\} dz,
\end{aligned} \tag{4.13a}$$

$$\hat{\lambda}_i(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} \lambda_i \tilde{C}_i(z, t) dz, \tag{4.13b}$$

$$\hat{\beta}_i(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \sum_{g=1}^G \int_0^H C_i^*(z) \beta_i \nu_{\Sigma_{f,g}} \phi_g^0(z) dz, \tag{4.13c}$$

$$\hat{\beta}(t) \equiv \sum_{i=1}^I \hat{\beta}_i(t), \tag{4.13d}$$

$$\Lambda(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \frac{1}{v_g} \phi_g^0(z) dz, \tag{4.13e}$$

$$\Lambda_i(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \int_0^H C_i^*(z) \tilde{C}_i(z, t) dz, \tag{4.13f}$$

$$\mu_i(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \int_0^H \left\{ \sum_{g=1}^G \chi_{i,g} \phi_g^*(z) - C_i^*(z) \right\} \frac{\Delta u(t)}{u_0} \lambda_i \tilde{C}_i(z, t) dz, \tag{4.13g}$$

$$\eta_i(t) \equiv \frac{1}{F(t)} C_i^*(H) u(t) \tilde{C}_i(H, t), \tag{4.13h}$$

$$\sigma_i(t) \equiv \frac{1}{F(t)} C_i^*(0) u(t) \xi_i(t) \tilde{C}_i(H, t - \tau(t)). \quad (4.13i)$$

O fator de normalização $F(t)$ representa a importância [41][42][43] da taxa total de produção de nêutrons, prontos e atrasados, pela fissão. Esse parâmetro é dado por:

$$F(t) \equiv \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \left\{ \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i \tilde{C}_i(z, t) + (1 - \beta) \chi_{p,g} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g'}^0(z) \right\} dz. \quad (4.14)$$

Esse fator é útil pois faz com que os valores dos parâmetros sejam independentes da normalização usada para as variáveis, além de atribuir significados físicos para eles [44]. Os parâmetros cinéticos podem ser descritos como [37][45]:

- $\rho(t)$: expressão perturbativa da reatividade do sistema, parâmetro relacionado às perturbações dos parâmetros nucleares (adimensional);
- $\hat{\beta}_i(t)$: fração efetiva de nêutrons da i -ésima família de precursores (adimensional);
- $\Lambda(t)$: tempo médio de geração de nêutrons (unidade de tempo);
- $\hat{\lambda}_i(t)$: parâmetro relacionado a uma modificação da constante de decaimento para a i -ésima família de precursores (adimensional);
- $\Lambda_i(t)$: parâmetro associado com o tempo médio de vida da i -ésima família de precursores que é modificada devido ao escoamento do combustível (unidade de tempo);
- $\mu_i(t)$: parâmetro relacionado com uma perturbação na velocidade de escoamento, que pode causar um acréscimo ou decréscimo de precursores da i -ésima família decaindo no núcleo (adimensional);
- $\eta_i(t)$: parâmetro associado com a saída dos precursores da i -ésima família pela fronteira entre o reator e a tubulação externa (adimensional);
- $\sigma_i(t)$: parâmetro relacionado à reentrada dos precursores da i -ésima família que não decaíram durante o trânsito pela tubulação externa, e que dá origem ao termo atrasado (adimensional).

4.2 Relação entre os parâmetros cinéticos de combustível líquido e os de combustível sólido

Para compararmos os parâmetros cinéticos entre os modelos de combustível líquido e sólido, primeiro consideramos $u_0 = 0$ na equação dos precursores adjuntos dada pela equação (2.6b)

$$C_i^*(z) = \sum_{g=1}^G \chi_{i,g} \phi_g^*(z). \quad (4.15)$$

Ou seja, no caso de combustível sólido, os precursores adjuntos são proporcionais ao fluxo adjunto. Substituindo essa expressão para os precursores adjuntos nas equações (4.11a) e (4.11b), obtemos

$$\begin{aligned} & \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \frac{1}{v_g} \phi_g^0(z) dz \right] \frac{dP}{dt} = \left\{ \sum_{g=1}^G \int_0^H \left[- \frac{d\phi_g^*}{dz} \Delta D_g \frac{d\phi_g^0}{dz} \right. \right. \\ & + \sum_{g'=1}^G \phi_g^*(z) \left\{ \Delta \Sigma_{s,g' \rightarrow g} + \chi_{t,g} \Delta(\nu \Sigma_{f,g'}) - \Delta \Sigma_{t,g} \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'}^0(z) \Big] dz \\ & \left. - \sum_{i=1}^I \left[\sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} \beta_i \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g'}^0(z) dz \right] \right\} P(t) \\ & + \sum_{i=1}^I \left[\lambda_i \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} C_i(z, t) dz \right], \end{aligned} \quad (4.16a)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} C_i(z, t) dz \right] &= \left[\sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} \beta_i \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g'}^0(z) dz \right] P(t) \\ &- \lambda_i \left[\sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} C_i(z, t) dz \right], \end{aligned} \quad (4.16b)$$

onde o primeiro termo da terceira linha da equação (4.11a),

$$\begin{aligned} & \sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^I \int_0^H C_i^*(z) \beta_i \Delta(\nu \Sigma_{f,g}) \phi_g^0(z) dz \\ &= \sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \sum_{i=1}^I \int_0^H \chi_{i,g'} \phi_{g'}^*(z) \beta_i \Delta(\nu \Sigma_{f,g}) \phi_g^0(z) dz \\ &= \sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \left[\sum_{i=1}^I \beta_i \chi_{i,g} \right] \Delta(\nu \Sigma_{f,g'}) \phi_{g'}^0(z) dz, \end{aligned} \quad (4.17)$$

foi agrupado com o segundo termo da segunda linha da mesma equação,

$$\sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) (1 - \beta) \chi_{p,g} \Delta(\nu \Sigma_{f,g'}) \phi_{g'}^0(z) dz, \quad (4.18)$$

dando origem ao segundo termo da segunda linha da equação (4.16a),

$$\sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{t,g} \Delta(\nu \Sigma_{f,g'}) \phi_{g'}^0(z) dz, \quad (4.19)$$

onde define-se o espectro de energia total de fissão (nêutrons prontos e atrasados)

$$\chi_{t,g} \equiv (1 - \beta) \chi_{p,g} + \sum_{i=1}^I \beta_i \chi_{i,g}. \quad (4.20)$$

Além disso, os termos que envolvem a forma espacial $\tilde{C}_i(z, t)$ e o fator de amplitude $G_i(t)$ dos precursores foram agrupados de volta na concentração de precursores $C_i(z, t)$.

Podemos ver que as equações (4.16a) e (4.16b) são as mesmas desenvolvidas por Henry [37] para o caso de combustível sólido, apenas usando notações diferentes.

Definindo os parâmetros

$$\begin{aligned} \rho(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \sum_{g=1}^G \int_0^H \left[\sum_{g'=1}^G \phi_g^*(z) \left\{ \Delta \Sigma_{s,g' \rightarrow g} + \chi_{t,g} \Delta(\nu \Sigma_{f,g'}) \right. \right. \\ \left. \left. - \Delta \Sigma_{t,g} \delta_{gg'} \right\} \phi_{g'}^0(z) - \frac{d\phi_g^*}{dz} \Delta D_g \frac{d\phi_g^0}{dz} \right] dz, \end{aligned} \quad (4.21a)$$

$$\hat{\beta}_i(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} \beta_i \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g'}^0(z) dz, \quad (4.21b)$$

$$\hat{\beta}(t) \equiv \sum_{i=1}^I \hat{\beta}_i(t), \quad (4.21c)$$

$$\Lambda(t) \equiv \frac{1}{F(t)} \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \frac{1}{v_g} \phi_g^0(z) dz, \quad (4.21d)$$

$$C_i(t) \equiv \frac{1}{\Lambda(t) F(t)} \sum_{g=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{i,g} C_i(z, t) dz, \quad (4.21e)$$

$$F(t) \equiv \sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \int_0^H \phi_g^*(z) \chi_{t,g} \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g'}^0(z) dz, \quad (4.21f)$$

as equações da cinética pontual para combustível sólido ficam

$$\frac{dP(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \hat{\beta}(t)}{\Lambda(t)} P(t) + \sum_{i=1}^I \lambda_i(t) C_i(t), \quad (4.22a)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i(t)}{\Lambda(t)} P(t) - \lambda_i(t) C_i(t). \quad (4.22b)$$

Comparando os parâmetros cinéticos presentes no modelo proposto de cinética pontual para combustível líquido, obtidos na seção anterior, com os parâmetros definidos de forma mais usual para combustível sólido, podemos identificar as diferenças entre eles. Os parâmetros μ_i , η_i e σ_i existem apenas no caso de combustível líquido pois tornam-se nulos quando não há escoamento do combustível. Já os parâmetros $\hat{\lambda}_i$ e Λ_i surgem devido à presença do termo convectivo que aparece na equação dos precursores quando há escoamento, fazendo com que a concentração adjunta de precursores deixe de ser diretamente proporcional ao fluxo adjunto.

Outra diferença entre os modelos é a definição da variável que representa os precursores, que enquanto no modelo de combustível líquido é usado o fator de amplitude $G_i(t)$ obtido pela separação de variáveis dos precursores, no modelo de combustível sólido usa-se o parâmetro $C_i(t)$, que, além de depender da concentração de precursores $C_i(z, t)$, também depende dos parâmetros $\phi_g^*(z)$, $\Lambda_i(t)$, $F(t)$ e $\chi_{i,g}$. Essa diferença de definição é também motivo do surgimento dos parâmetros $\hat{\lambda}_i$ e Λ_i .

O fator de normalização $F(t)$ (expressão (4.14)) é definido com a forma espacial tanto dos precursores quanto do fluxo, pois não pode ser simplificado para depender apenas do fluxo, como na definição (4.21f), devido à forma espacial dos precursores não ser diretamente proporcional à do fluxo.

No próximo capítulo, as equações da cinética pontual obtidas aqui são usadas para desenvolver o modelo de cinética inversa, na qual a reatividade $\rho(t)$ é a incógnita do sistema, e o fator de amplitude $P(t)$ é um parâmetro de entrada.

Capítulo 5

Modelo de Cinética Inversa

O modelo de cinética inversa tem por objetivo usar as equações da cinética pontual para resolver o problema inverso. Na cinética pontual, determina-se a evolução da potência (dada pelo fator de amplitude $P(t)$, em unidades relativas à potência pré-transiente) a partir de perturbações externas, já conhecidas, nos parâmetros nucleares (presentes na reatividade ρ) ou na velocidade de escoamento (presente no parâmetro μ_i). Já nas equações da cinética inversa (ECI), queremos determinar a reatividade $\rho(t)$ necessária para obtermos um perfil de potência $P(t)$ desejado.

Partindo da equação da cinética pontual para o fator de amplitude $P(t)$, Eq. (4.12a), podemos resolvê-la para a reatividade $\rho(t)$

$$\rho(t) = \hat{\beta}(t) + \frac{\Lambda(t)}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{1}{P(t)} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i(t) G_i(t), \quad (5.1)$$

onde o fator de amplitude dos precursores $G_i(t)$ é calculado pela equação (4.12b)

$$\Lambda_i(t) \frac{dG_i(t)}{dt} = \hat{\beta}_i(t) P(t) - \left[\hat{\lambda}_i(t) + \mu_i(t) + \eta_i(t) \right] G_i(t) + \sigma_i(t) G_i(t - \tau(t)). \quad (5.2)$$

Devido à dependência temporal dos parâmetros cinéticos e do tempo de trânsito $\tau(t)$, além de ser uma equação diferencial atrasada devido ao termo $G_i(t - \tau(t))$, a equação dos precursores não possuirá solução analítica. No entanto, como será explicado no capítulo 6, os parâmetros cinéticos variam mais lentamente do que os fatores de amplitude ao longo do transiente, de forma que podemos considerá-los constantes e atualizar seus valores após cada atualização da forma espacial

dos precursores. Com isso, podemos fazer algumas aproximações para obtermos soluções analíticas e semi-analíticas que serão úteis para verificar a validade do método numérico, além de servirem para compararmos com soluções já conhecidas da cinética inversa para reatores a combustível sólido.

Vale ressaltar que o modelo de cinética inversa apresentado pode ser aplicado em casos com realimentação termo-hidráulica sem grandes modificações. Nesses casos, a reatividade $\rho(t)$ é composta pela reatividade externa, ρ_{ext} , e pelas reatividades oriundas da realimentação termo-hidráulica, entre elas a resultante da variação da temperatura do combustível (efeito Doppler), ρ_{comb} , e pela variação da temperatura do moderador, ρ_{mod} . Se considerarmos apenas esses dois efeitos de realimentação, a reatividade $\rho(t)$ poderia ser decomposta em:

$$\rho(t) = \rho_{ext}(t) + \rho_{comb}(t) + \rho_{mod}(t), \quad (5.3)$$

sendo ρ_{comb} e ρ_{mod} usualmente definidas como

$$\rho_{comb}(t) \equiv \alpha_f \left(\bar{T}_f(t) - \bar{T}_f(0) \right), \quad (5.4a)$$

$$\rho_{mod}(t) \equiv \alpha_m \left(\bar{T}_m(t) - \bar{T}_m(0) \right), \quad (5.4b)$$

onde α_f e α_m são os coeficientes de reatividade do combustível (ou coeficiente Doppler) e do moderador, respectivamente. As variáveis \bar{T}_f e \bar{T}_m são as temperaturas médias do combustível e do moderador, respectivamente.

A aplicação das ECI nos casos com realimentação termo-hidráulica é simples pois o sistema de equações composto por estas equações é linear, diferente do caso da cinética pontual. No caso das ECP, há um termo que envolve o produto entre a reatividade, que depende das temperaturas médias do combustível e moderador, e a potência do reator (proporcional ao fator de amplitude do fluxo de nêutrons). Como as temperaturas médias dependem da própria potência, isso dá origem a um sistema de equações não-lineares, mais complexo de ser resolvido. No entanto, no caso das ECI, como a variável dependente é a reatividade $\rho(t)$ e o fator de amplitude (ou potência) $P(t)$ é apenas um dado de entrada, o sistema resultante é linear, e as equações da ECI podem ser usadas para encontrar a reatividade externa ρ_{ext} :

$$\rho_{ext}(t) = -\left(\rho_{comb}(t) + \rho_{mod}(t)\right) + \hat{\beta}(t) + \frac{\Lambda(t)}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{1}{P(t)} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i(t) G_i(t), \quad (5.5)$$

com $G_i(t)$ obtido pela Eq. (5.2) vista anteriormente.

5.1 Solução semi-analítica

Uma solução semi-analítica pode ser obtida para calcular os fatores de amplitude dos precursores. Essa solução consiste em considerarmos o termo atrasado, $G_i(t - \tau(t))$, como um termo fonte. Com isso, a equação (5.2) pode ser escrita como

$$\frac{dG_i(t)}{dt} + A(t)G_i(t) = A_f P(t) + A_d(t)G_i(t - \tau(t)), \quad (5.6)$$

onde

$$A(t) \equiv \frac{\hat{\lambda}_i(t) + \mu_i(t) + \eta_i(t)}{\Lambda_i(t)}, \quad (5.7a)$$

$$A_d(t) \equiv \frac{\sigma_i(t)}{\Lambda_i(t)}, \quad (5.7b)$$

$$A_f(t) \equiv \frac{\hat{\beta}_i(t)}{\Lambda_i(t)}, \quad (5.7c)$$

Cada um desses coeficientes é diferente para cada família i de precursores, mas foi omitido o índice i por simplicidade.

Se considerarmos momentaneamente o lado direito da equação como um termo não homogêneo,

$$Q_i(t) = A_f(t)P(t) + A_d(t)G_i(t - \tau(t)), \quad (5.8)$$

teremos então a seguinte equação diferencial

$$\frac{dG_i(t)}{dt} + A(t)G_i(t) = Q_i(t). \quad (5.9)$$

Com isso, formalmente tornamos a equação dos precursores em uma equação diferencial ordinária, mas não esquecemos que o termo atrasado $A_d(t)G_i(t - \tau(t))$ está dentro do termo fonte $Q_i(t)$. Para resolver essa equação, usamos o fator integrante $e^{R_i(t)}$, onde

$$R_i(t) \equiv \int_0^t A(t') dt', \quad (5.10)$$

e então obtemos a seguinte solução

$$G_i(t) = \left\{ 1 + \int_0^t Q_i(t') e^{R_i(t')} dt' \right\} e^{-R_i(t)}. \quad (5.11)$$

onde lembramos que $G_i(0) = 1$. Ao substituirmos $Q_i(t)$ na expressão de $G_i(t)$, obteremos

$$G_i(t) = \left\{ 1 + \int_0^t \left[A_f(t')P(t') + A_d(t')G_i(t' - \tau(t)) \right] e^{R_i(t')} dt' \right\} e^{-R_i(t)}. \quad (5.12)$$

Apesar de a solução $G_i(t)$ depender de uma integral dela mesma, a integral será sempre sobre valores já conhecidos de $G_i(t)$ devido ao seu argumento $t - \tau(t)$, dando origem a uma solução semi-analítica que é facilmente determinada numericamente. No capítulo 6 será mostrado o método usado para determinar numericamente essa solução semi-analítica.

5.2 Aproximação de parâmetros cinéticos e de tempo de trânsito constantes

Para obtermos uma solução analítica, uma aproximação possível de ser feita é considerar todos os parâmetros da equação (5.2) constantes. Para isso, teremos que desconsiderar a variação temporal do tempo de trânsito τ , enquanto que os parâmetros cinéticos continuarão sendo atualizados após cada atualização da forma espacial dos precursores \tilde{C}_i . No entanto, como os parâmetros μ_i , η_i e σ_i dependem diretamente da velocidade de escoamento $u(t)$, eles não poderiam ser atualizados na mesma escala de tempo dos outros parâmetros, e sim na mesma escala de tempo dos fatores de amplitude. Por isso, para fazermos essa aproximação, será necessário que a velocidade de escoamento ou continue com o mesmo valor pré-transiente u_0 , ou que varie em $t = 0$ para uma velocidade u_f que permanecerá constante durante todo o transiente. No caso em que a velocidade se mantém igual a u_0 , o tempo de trânsito τ não precisa de aproximação, pois já será constante, tornando a solução mais precisa. A equação (5.2) poderá ser escrita, então, como:

$$\frac{dG_i(t)}{dt} + A G_i(t) - A_d G_i(t - \tau) = A_f P(t), \quad (5.13)$$

onde

$$A \equiv \frac{\hat{\lambda}_i + \mu_i + \eta_i}{\Lambda_i}, \quad (5.14a)$$

$$A_d \equiv \frac{\sigma_i}{\Lambda_i}, \quad (5.14b)$$

$$A_f \equiv \frac{\hat{\beta}_i}{\Lambda_i}. \quad (5.14c)$$

A solução dessa equação será dada pela combinação da solução homogênea e da particular:

$$G_i(t) = G_{i,h}(t) + G_{i,p}(t), \quad (5.15)$$

onde a solução homogênea $G_{i,h}(t)$ é dada por (apêndice A)

$$G_{i,h}(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1 + \frac{A_d}{r_k} (1 - e^{-r_k \tau})}{1 + A_d \tau e^{-r_k \tau}} e^{r_k t}, \quad (5.16)$$

e o parâmetro r_k é definido pelas raízes da equação característica do problema:

$$\begin{aligned} r_k + A - A_d e^{-r_k \tau} &= 0, \\ r_k &= \frac{1}{\tau} W_k(A_d \tau e^{A\tau}) - A. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Podemos encontrar a solução particular $G_{i,p}(t)$ usando a transformada de Laplace. Sabendo as seguintes transformadas:

$$\mathcal{L}\{G_i(t)\}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} G_i(t) dt \equiv F_i(s), \quad (5.18a)$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{dG_i(t)}{dt}\right\}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} \frac{dG_i(t)}{dt} dt = sF_i(s) - 1, \quad (5.18b)$$

$$\mathcal{L}\{G_i(t - \tau)\}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} G_i(t - \tau) dt = \frac{1 - e^{-s\tau}}{s} + e^{-s\tau} F_i(s), \quad (5.18c)$$

$$\mathcal{L}\{P(t)\}(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} P(t) dt \equiv J(s), \quad (5.18d)$$

podemos aplicar a transformada de Laplace na equação diferencial (5.13), obtendo

$$sF_i(s) - 1 + AF_i(s) - A_d e^{-s\tau} F_i(s) - \frac{A_d}{s} (1 - e^{-s\tau}) = A_f J(s), \quad (5.19)$$

Resolvendo para $F_i(s)$, temos

$$F_i(s) = \frac{1 + \frac{A_d}{s} (1 - e^{-s\tau})}{s + A - A_d e^{-s\tau}} + \frac{A_f J(s)}{s + A - A_d e^{-s\tau}}. \quad (5.20)$$

O primeiro termo do lado direito dessa equação pode ser identificado como a transformada da solução homogênea (apêndice A), enquanto que o segundo é a transformada da particular. Assim:

$$F_{i,p}(s) = \frac{A_f J(s)}{s + A - A_d e^{-s\tau}}. \quad (5.21)$$

O denominador da equação (5.21) é a própria equação característica do problema, que possui raízes r_k . Além disso, o denominador é um polinômio exponencial, que consiste de polinômios em uma variável multiplicados por exponenciais dessa mesma variável. De forma similar aos polinômios convencionais, esse polinômio também pode ser fatorizado [46][47]:

$$\frac{A_f J(s)}{s + A - A_d e^{-s\tau}} = A_f J(s) \prod_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1}{s - r_k}, \quad (5.22)$$

Como não há raízes repetidas, o produtório dessa equação pode ser decomposto como [48]

$$\prod_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{s - r_k} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{C'_k}{s - r_k}, \quad (5.23)$$

simplificando a equação (5.22) para

$$\frac{A_f J(s)}{s + A - A_d e^{-s\tau}} = A_f J(s) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{C'_k}{s - r_k}. \quad (5.24)$$

Os coeficientes C'_k podem ser calculados da mesma forma que os coeficientes C_n da solução homogênea (apêndice A): passa-se o denominador $s + A + A_d e^{-s\tau}$ do lado esquerdo para o numerador do lado direito e toma-se o limite $s \rightarrow r_m$. Os termos onde $k \neq m$ se anulam (pois são raízes do numerador) e sobra apenas o termo com $k = m$, cujo limite pode ser resolvido usando-se a regra de L'Hôpital. Temos, então,

$$C'_k = \frac{1}{1 + A_d \tau e^{-r_k \tau}}, \quad (5.25)$$

onde o índice m foi substituído por k . Assim, a transformada de Laplace da solução particular fica:

$$F_{i,p}(s) = A_f J(s) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{C'_k}{s - r_k}. \quad (5.26)$$

Identificando duas funções de s na equação (5.26), $\sum_{k=-\infty}^{\infty} C'_k / (s - r_k)$ e $A_f J(s)$, a transformada inversa de Laplace será dada pela convolução das transformadas inversas de cada uma dessas funções. Assim:

$$G_{i,p}(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_0^t \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{C'_k}{s - r_k} \right\} (t - t') \mathcal{L}^{-1} \{ A_f J(s) \} (t') dt'. \quad (5.27)$$

Sabendo que $\mathcal{L}^{-1} \{ 1/(s - r_k) \} (t) = e^{r_k t}$, finalmente obtemos a expressão para a solução particular do problema

$$G_{i,p}(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \int_0^t C'_k e^{r_k(t-t')} A_f P(t') dt'. \quad (5.28)$$

Com isso, podemos escrever a solução final para $G_i(t)$ para o caso não-homogêneo

$$G_i(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{r_k t}}{1 + A_d \tau e^{-r_k \tau}} \left[1 + \frac{A_d}{r_k} (1 - e^{-r_k \tau}) + A_f \int_0^t P(t') e^{-r_k t'} dt' \right]. \quad (5.29)$$

A partir da expressão (5.29), podemos verificar a consistência dessa solução. Tomando $A_d = 0$, obtemos

$$G_i(t) = e^{-At} \left[1 + A_f \int_0^t P(t') e^{At'} dt' \right], \quad (5.30)$$

onde

$$r_k = \frac{1}{\tau} W_k(0) - A \Rightarrow \begin{cases} r_k = -A, & \text{se } k = 0, \\ r_k \rightarrow -\infty, & \text{se } k \neq 0, \end{cases} \quad (5.31)$$

sendo a segunda equação responsável por anular todos os termos do somatório para os quais $k \neq 0$, visto que estão multiplicados por $e^{r_k t}$ que tenderá a 0. Se fizermos $A_d = 0$ também na equação (5.13), obtemos uma equação diferencial ordinária que possui a mesma solução (5.30), provando assim sua consistência.

Podemos simplificar a solução de $G_i(t)$ ao analisarmos as raízes r_k da equação característica do problema. Sabendo que $W_{-k}(\omega) = W_k^*(\omega)$ quando $\omega > 0$, onde a notação W_k^* indica o complexo conjugado de W_k , deduzimos que também $r_{-k} = r_k^*$, visto que r_k é uma combinação linear de $W_k(\omega)$ com números reais e o argumento $\omega = A_d \tau e^{A\tau} = \sigma_i \Lambda_i^{-1} \tau e^{A\tau}$ também é positivo. As raízes r_k podem, então, ser separadas nas suas partes reais e imaginárias:

$$r_k = \alpha_k + i\beta_k, \quad (5.32)$$

e, conseqüentemente,

$$r_{-k} = r_k^* = \alpha_k - i\beta_k, \quad (5.33)$$

onde

$$\alpha_k \equiv \frac{1}{\tau} \operatorname{Re} \left(W_k(A_d \tau e^{A\tau}) \right) - A, \quad (5.34a)$$

$$\beta_k \equiv \frac{1}{\tau} \operatorname{Im} \left(W_k(A_d \tau e^{A\tau}) \right). \quad (5.34b)$$

Separando o somatório da solução de $G_i(t)$ nas partes em que k é negativo, nulo e positivo, temos

$$G_i(t) = \sum_{k=-\infty}^{-1} \frac{H_k(t)}{2} e^{r_k t} + \frac{H_0(t)}{2} e^{r_0 t} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{H_k(t)}{2} e^{r_k t}, \quad (5.35)$$

e substituindo k por $-k$ no primeiro somatório:

$$G_i(t) = \frac{H_0(t)}{2} e^{r_0 t} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{H_k(t)}{2} e^{r_k t} + \frac{H_{-k}(t)}{2} e^{r_k^* t} \right], \quad (5.36)$$

onde

$$H_k(t) \equiv \frac{2}{1 + A_d \tau e^{-r_k \tau}} \left[1 + \frac{A_d}{r_k} (1 - e^{-r_k \tau}) + A_f \int_0^t P(t') e^{-r_k t'} dt' \right]. \quad (5.37)$$

Como $H_k(t)$ é composto por exponenciais e polinômios de r_k , ao conjugar-mos r_k em sua expressão obteremos sua conjugada, $H_k^*(t)$, e, da mesma forma como $r_{-k} = r_k^*$, temos também que $H_{-k}(t) = H_k^*(t)$. Além disso, sabendo que $e^{r_k t} = e^{\alpha_k t} [\cos(\beta_k t) + i \sin(\beta_k t)]$ e $e^{r_k^* t} = e^{\alpha_k t} [\cos(\beta_k t) - i \sin(\beta_k t)]$, podemos então simplificar os termos dentro do somatório da equação (5.36):

$$G_i(t) = \frac{H_0(t)}{2} e^{\alpha_0 t} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{H_k(t) + H_k^*(t)}{2} \cos(\beta_k t) + i \frac{H_k(t) - H_k^*(t)}{2} \sin(\beta_k t) \right] e^{\alpha_k t}, \quad (5.38)$$

onde foi usado $\beta_0 = 0$, pois como o argumento $A_d \tau e^{A\tau}$ é sempre positivo, a função W_0 não terá parte imaginária (apêndice A).

Podemos ver na equação (5.38) que o termo $[H_k(t) + H_k^*(t)]/2$ é a parte real de $H_k(t)$, enquanto que $i[H_k(t) - H_k^*(t)]/2$ é a parte imaginária de $H_k(t)$ mas com sinal invertido. Assim, essa equação pode ser escrita como

$$G_i(t) = \frac{H_0(t)}{2} e^{\alpha_0 t} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[\operatorname{Re}(H_k(t)) \cos(\beta_k t) - \operatorname{Im}(H_k(t)) \sin(\beta_k t) \right] e^{\alpha_k t}. \quad (5.39)$$

Com essa expressão, quando truncarmos o somatório para N termos precisaremos calcular apenas $N + 1$ coeficientes, que é aproximadamente metade dos $2N + 1$ coeficientes que seriam necessários calcular se não identificássemos a relação de H_k com H_{-k} , tornando a avaliação numérica da solução mais eficiente computacionalmente. Substituindo essa solução de $G_i(t)$ na expressão da reatividade, obtemos:

$$\begin{aligned} \rho(t) = & \hat{\beta} + \frac{\Lambda}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{1}{P(t)} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i \left\{ \frac{H_0(t)}{2} e^{\alpha_0 t} \right. \\ & \left. + \sum_{k=1}^{\infty} \left[\operatorname{Re}(H_k(t)) \cos(\beta_k t) - \operatorname{Im}(H_k(t)) \sin(\beta_k t) \right] e^{\alpha_k t} \right\}, \end{aligned} \quad (5.40)$$

e lembrando que todos os parâmetros são atualizados conforme a forma espacial dos precursores for sendo recalculada.

Capítulo 6

Soluções Numéricas

Neste capítulo será detalhado o método numérico usado para resolver cada modelo mostrado nas seções anteriores: sistema estacionário e equações adjuntas, cinética espacial, cinética pontual, e cinética inversa.

6.1 Equações do sistema estacionário e das variáveis adjuntas

Para resolver numericamente as equações do sistema estacionário, será usado o método de diferenças finitas centrado na interface [49], [50]. As derivadas do fluxo de nêutrons e das concentrações de precursores são discretizadas da seguinte forma:

$$\left. \frac{d^2 \phi_g^0(z)}{dz^2} \right|_{z=z_j} \approx \frac{\phi_{g,j+1}^0 - 2\phi_{g,j}^0 + \phi_{g,j-1}^0}{\Delta z^2}, \quad (6.1a)$$

$$\left. \frac{dC_i^0(z)}{dz} \right|_{z=z_j} \approx \frac{C_{i,j}^0 - C_{i,j-1}^0}{\Delta z}, \quad (6.1b)$$

onde

$$z_j = j\Delta z; \quad j = 0, \dots, N; \quad (6.2a)$$

$$\Delta z = H/N; \quad (6.2b)$$

$$\phi_{g,j}^0 \equiv \phi_g^0(z_j); \quad g = 1, \dots, G; \quad (6.2c)$$

$$C_{i,j}^0 \equiv C_i^0(z_j); \quad i = 1, \dots, I; \quad (6.2d)$$

sendo Δz o tamanho da malha axial e N o número de divisões da discretização

espacial do eixo z . Avaliando as equações (2.4a) e (2.4b) do sistema estacionário em $z = z_j$, obtemos:

$$-\frac{D_g^0}{\Delta z^2} \phi_{g,j+1}^0 + \left[\Sigma_{t,g}^0 + 2 \frac{D_g^0}{\Delta z^2} \right] \phi_{g,j}^0 - \frac{D_g^0}{\Delta z^2} \phi_{g,j-1}^0 - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^0 \phi_{g',j}^0 - \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_{i,j}^0 = \frac{1}{k_{eff}} (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}^0 \phi_{g',j}^0, \quad (6.3a)$$

$$\left[\frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,j}^0 - \frac{u_0}{\Delta z} C_{i,j-1}^0 = \frac{1}{k_{eff}} \beta_i \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}^0 \phi_{g',j}^0, \quad (6.3b)$$

enquanto que as condições de contorno discretizadas ficam

$$\phi_{g,0}^0 = 0 = \phi_{g,N}^0, \quad (6.4a)$$

$$C_{i,0}^0 = C_{i,N}^0 \xi_i^0. \quad (6.4b)$$

As equações (6.3a) e (6.3b) valem para $j = 1, \dots, N - 1$ e a equação (6.3b) pode ser avaliada em $j = N$ para relacionarmos $C_{i,N}^0$ com $C_{i,N-1}^0$:

$$\left[\frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,N}^0 - \frac{u_0}{\Delta z} C_{i,N-1}^0 = 0, \quad (6.5)$$

$$C_{i,N}^0 = \frac{1}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} C_{i,N-1}^0.$$

Avaliando as equações (6.3a) e (6.3b) em $j = 1$, usando as condições de contorno (6.4a) e (6.4b) e substituindo a relação (6.5), as equações ficam:

$$-\frac{D_g^0}{\Delta z^2} \phi_{g,2}^0 + \left[\Sigma_{t,g}^0 + 2 \frac{D_g^0}{\Delta z^2} \right] \phi_{g,1}^0 - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^0 \phi_{g',1}^0 - \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_{i,1}^0 = \frac{1}{k_{eff}} (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}^0 \phi_{g',1}^0, \quad (6.6a)$$

$$\left[\frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,1}^0 - \frac{u_0}{\Delta z} \frac{\xi_i^0}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} C_{i,N-1}^0 = \frac{1}{k_{eff}} \beta_i \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}^0 \phi_{g',1}^0. \quad (6.6b)$$

Em $j = N - 1$, substituindo a condição de contorno na equação (6.3a), temos:

$$\left[\Sigma_{t,g}^0 + 2 \frac{D_g^0}{\Delta z^2} \right] \phi_{g,N-1}^0 - \frac{D_g^0}{\Delta z^2} \phi_{g,N-2}^0 - \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}^0 \phi_{g',N-1}^0 - \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_{i,N-1}^0 = \frac{1}{k_{eff}} (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}^0 \phi_{g',N-1}^0. \quad (6.7)$$

Com isso, podemos escrever as equações discretizadas na sua forma matricial:

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\psi}_0 = \frac{1}{k_{eff}}\mathbf{F}\boldsymbol{\psi}_0, \quad (6.8)$$

onde \mathbf{A} e \mathbf{F} são matrizes em blocos, de dimensão $(G + I) \times (N - 1)$, e $\boldsymbol{\psi}_0$ é uma matriz coluna com os fluxos e precursores discretizados:

$$\mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} -\mathbf{D}_1^0 + \mathbf{S}_{1,1}^0 & \cdots & \mathbf{S}_{1,G}^0 & -\mathbf{P}_{1,1}^f & \cdots & -\mathbf{P}_{1,I}^f \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{S}_{G,1}^0 & \cdots & -\mathbf{D}_G^0 + \mathbf{S}_{G,G}^0 & -\mathbf{P}_{G,1}^f & \cdots & -\mathbf{P}_{G,I}^f \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{P}_1^0 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{P}_I^0 \end{bmatrix}, \quad (6.9a)$$

$$\mathbf{F} \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{1,1}^{f,0} & \cdots & \mathbf{F}_{1,G}^{f,0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{F}_{G,1}^{f,0} & \cdots & \mathbf{F}_{G,G}^{f,0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{F}_{1,1}^{p,0} & \cdots & \mathbf{F}_{1,G}^{p,0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{F}_{I,1}^{p,0} & \cdots & \mathbf{F}_{I,G}^{p,0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (6.9b)$$

$$\boldsymbol{\psi}_0 \equiv [\phi_1^0, \dots, \phi_g^0, \dots, \phi_G^0, \mathbf{C}_1^0, \dots, \mathbf{C}_i^0, \dots, \mathbf{C}_I^0]^\top, \quad (6.9c)$$

$$\phi_g^0 \equiv [\phi_{g,1}^0, \dots, \phi_{g,j}^0, \dots, \phi_{g,N-1}^0]^\top, \quad (6.9d)$$

$$\mathbf{C}_i^0 \equiv [C_{i,1}^0, \dots, C_{i,j}^0, \dots, C_{i,N-1}^0]^\top, \quad (6.9e)$$

e os blocos $\mathbf{S}_{g,g'}^0$, $\mathbf{P}_{g,i}^f$, $\mathbf{F}_{g,g}^{f,0}$, $\mathbf{F}_{i,g}^{p,0}$, \mathbf{D}_g^0 e \mathbf{P}_i^0 , são matrizes de dimensão $(N - 1)$ definidos por:

$$\mathbf{S}_{g,g'}^0 \equiv \begin{cases} \Sigma_{R,g}^0 \mathbf{I}_{N-1}, & \text{se } g = g', \\ -\Sigma_{s,g' \rightarrow g}^0 \mathbf{I}_{N-1}, & \text{se } g \neq g', \end{cases} \quad (6.10a)$$

$$\mathbf{P}_{g,i}^f \equiv \chi_{i,g} \lambda_i \mathbf{I}_{N-1}, \quad (6.10b)$$

$$\mathbf{F}_{g,g'}^{f,0} \equiv (1 - \beta) \chi_g (\nu \Sigma_{f,0})_{g'} \mathbf{I}_{N-1}, \quad (6.10c)$$

$$\mathbf{F}_{i,g'}^{p,0} \equiv \beta_i (\nu \Sigma_{f,0})_{g'} \mathbf{I}_{N-1}, \quad (6.10d)$$

$$\mathbf{D}_g^0 \equiv \begin{bmatrix} -2 \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & -2 \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & -2 \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & \frac{D_g^0}{\Delta z^2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{D_g^0}{\Delta z^2} & -2 \frac{D_g^0}{\Delta z^2} \end{bmatrix}, \quad (6.10e)$$

$$\mathbf{P}_i^0 \equiv \begin{bmatrix} \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & -\frac{u_0}{\Delta z} \frac{\xi_i^0}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} \\ -\frac{u_0}{\Delta z} & \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -\frac{u_0}{\Delta z} & \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\frac{u_0}{\Delta z} & \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i \end{bmatrix}, \quad (6.10f)$$

onde $\Sigma_{R,g}^0 \equiv \Sigma_{t,g}^0 - \Sigma_{s,g \rightarrow g}^0$ é a seção de choque macroscópica de remoção do grupo g , \mathbf{I}_{N-1} é a matriz identidade de dimensão $(N-1)$, $\mathbf{0}$ é a matriz nula de dimensão $(N-1)$ e os índices 0 indicam que as matrizes são para o caso estacionário.

A equação (6.8) pode ser reescrita como:

$$(\mathbf{A}^{-1}\mathbf{F})\boldsymbol{\psi}_0 = k_{eff} \boldsymbol{\psi}_0 \quad (6.11)$$

sendo o fator de multiplicação efetivo k_{eff} o maior autovalor da matriz $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{F}$ e $\boldsymbol{\psi}_0$ o autovetor respectivo, que podem ser calculados pelo método das potências [51].

Vale lembrar que o autovetor $\boldsymbol{\psi}_0$ não contém os fluxos e os precursores avaliados nas fronteiras. Esses serão dados pelas condições de contorno (6.4a), (6.4b) e pela relação (6.5):

$$\phi_{g,0}^0 = 0 = \phi_{g,N}^0, \quad (6.12a)$$

$$C_{i,0}^0 = \frac{\xi_i^0}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} C_{i,N-1}^0, \quad (6.12b)$$

$$C_{i,N}^0 = \frac{1}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} C_{i,N-1}^0. \quad (6.12c)$$

A normalização do vetor solução $\boldsymbol{\psi}_0$ é dado pela potência, de forma que

$$P_{ot}^0 = \sum_{g=1}^G \int_0^H w \Sigma_{f,g}^0 \phi_g^0(z) dz, \quad (6.13)$$

na qual w é a energia média liberada por fissão. Usando o método dos trapézios para calcular numericamente a integral, a expressão para a potência fica:

$$P_{ot}^0 \approx \sum_{g=1}^G w \Sigma_{f,g}^0 \sum_{j=1}^{N-1} \phi_{g,j}^0 \Delta z. \quad (6.14)$$

A solução numérica das equações das variáveis adjuntas é similar à do caso estacionário. A equação matricial é dada por

$$[(\mathbf{A}^*)^{-1} \mathbf{F}^*] \boldsymbol{\psi}^* = k_{eff} \boldsymbol{\psi}^*, \quad (6.15)$$

onde as matrizes \mathbf{A}^* , \mathbf{F}^* e $\boldsymbol{\psi}^*$ são dadas por

$$\mathbf{A}^* \equiv \begin{bmatrix} -\mathbf{D}_1^0 + \mathbf{S}_{1,1}^0 & \cdots & \mathbf{S}_{G,1}^0 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{S}_{1,G}^0 & \cdots & -\mathbf{D}_G^0 + \mathbf{S}_{G,G}^0 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ -\mathbf{P}_{1,1}^f & \cdots & -\mathbf{P}_{G,1}^f & \mathbf{P}_1^* & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\mathbf{P}_{1,I}^f & \cdots & -\mathbf{P}_{G,I}^f & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{P}_I^* \end{bmatrix}, \quad (6.16a)$$

$$\mathbf{P}_i^* \equiv \begin{bmatrix} \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i & -\frac{u_0}{\Delta z} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i & -\frac{u_0}{\Delta z} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i & -\frac{u_0}{\Delta z} \\ -\frac{u_0}{\Delta z} \frac{\xi_i^0}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \frac{u_0}{\Delta z} + \lambda_i \end{bmatrix}, \quad (6.16b)$$

$$\mathbf{F}^* \equiv \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{1,1}^{f,0} & \cdots & \mathbf{F}_{G,1}^{f,0} & \mathbf{F}_{1,1}^{p,0} & \cdots & \mathbf{F}_{I,1}^{p,0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{F}_{1,G}^{f,0} & \cdots & \mathbf{F}_{G,G}^{f,0} & \mathbf{F}_{1,G}^{p,0} & \cdots & \mathbf{F}_{I,G}^{p,0} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (6.16c)$$

$$\boldsymbol{\psi}^* \equiv [\boldsymbol{\phi}_1^*, \dots, \boldsymbol{\phi}_g^*, \dots, \boldsymbol{\phi}_G^*, \mathbf{C}_1^*, \dots, \mathbf{C}_i^*, \dots, \mathbf{C}_I^*]^\top, \quad (6.16d)$$

$$\boldsymbol{\phi}_g^* \equiv [\phi_{g,1}^*, \dots, \phi_{g,j}^*, \dots, \phi_{g,N-1}^*]^\top, \quad (6.16e)$$

$$\mathbf{C}_i^* \equiv [C_{i,1}^*, \dots, C_{i,j}^*, \dots, C_{i,N-1}^*]^\top. \quad (6.16f)$$

Podemos notar que as matrizes do caso adjunto são iguais às transpostas das matrizes do caso estacionário. Também no caso adjunto, o autovetor $\boldsymbol{\psi}^*$ não contém os fluxos e os precursores adjuntos avaliados nas fronteiras, que serão dados separadamente por:

$$\phi_{g,0}^* = 0 = \phi_{g,N}^*, \quad (6.17a)$$

$$C_{i,0}^* = \frac{1}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} C_{i,1}^*, \quad (6.17b)$$

$$C_{i,N}^* = \frac{\xi_i^0}{1 + \lambda_i \Delta z / u_0} C_{i,1}^*. \quad (6.17c)$$

6.2 Equações da cinética espacial

As equações (2.2a) e (2.2b) da cinética espacial serão resolvidas numericamente, fazendo primeiro a semi-discretização espacial e em seguida a integração numérica. A discretização das derivadas espaciais é igual à do caso estacionário.

6.2.1 Semi-discretização da Variável Espacial

Discretizando apenas a variável espacial, da mesma forma que foi feita na seção 6.1, obtemos as seguintes equações:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{d\phi_{g,j}}{dt} &= \frac{D_g}{\Delta z^2} \phi_{g,j+1} - \left[\Sigma_{t,g} + 2 \frac{D_g}{\Delta z^2} \right] \phi_{g,j} + \frac{D_g}{\Delta z^2} \phi_{g,j-1} + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g',j} \\ &+ (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g',j} + \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_{i,j}, \end{aligned} \quad (6.18a)$$

$$\frac{dC_{i,j}}{dt} = - \left[\frac{u}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,j} + \frac{u}{\Delta z} C_{i,j-1} + \beta_i \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g',j}, \quad (6.18b)$$

onde os fluxos, os precursores e a velocidade de escoamento continuam com suas dependências temporais. As condições iniciais e de contorno discretizadas são dadas por:

$$\phi_{g,0}(t) = 0 = \phi_{g,N}(t), \quad (6.19a)$$

$$\phi_{g,j}(0) = \phi_{g,j}^0, \quad (6.19b)$$

$$C_{i,0}(t) = C_{i,N}(t - \tau(t)) \xi_i(t), \quad (6.19c)$$

$$C_{i,j}(0) = C_{i,j}^0. \quad (6.19d)$$

As equações (6.18a) e (6.18b) valem para $j = 1, \dots, N - 1$. Avaliando essas equações em $j = 1$, usando as condições de contorno (6.19a) e (6.19c), e explicitando a dependência temporal, temos

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{d\phi_{g,1}(t)}{dt} &= \frac{D_g}{\Delta z^2} \phi_{g,2}(t) - \left[\Sigma_{t,g} + 2 \frac{D_g}{\Delta z^2} \right] \phi_{g,1}(t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g',1}(t) \\ &+ (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g',1}(t) + \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_{i,1}(t), \end{aligned} \quad (6.20a)$$

$$\frac{dC_{i,1}(t)}{dt} = - \left[\frac{u(t)}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,1}(t) + \frac{u(t)}{\Delta z} \xi_i(t) C_{i,N}(t - \tau(t)) + \beta_i \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g',1}(t). \quad (6.20b)$$

Na equação (6.20b), o termo $C_{i,N}(t - \tau(t))$ pode ser considerado como um termo fonte, pois como é a concentração de precursores avaliada num instante $t - \tau(t)$, ela já será conhecida quando estivermos no instante t . Avaliando a equação (6.18b) em $j = N$, pode-se obter uma relação entre $C_{i,N}$ e $C_{i,N-1}$:

$$\frac{dC_{i,N}(t)}{dt} = - \left[\frac{u(t)}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,N}(t) + \frac{u(t)}{\Delta z} C_{i,N-1}(t). \quad (6.21)$$

Avaliando a equação (6.18b) em $j = N - 1$ e substituindo a condição de contorno

(6.19a), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{d\phi_{g,N-1}(t)}{dt} = & - \left[\Sigma_{t,g} + 2 \frac{D_g}{\Delta z^2} \right] \phi_{g,N-1}(t) + \frac{D_g}{\Delta z^2} \phi_{g,N-2}(t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g',N-1}(t) \\ & + (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g',N-1}(t) + \sum_{i=1}^I \chi_{i,g} \lambda_i C_{i,N-1}(t). \end{aligned} \quad (6.22)$$

Esse sistema de equações semi-discretizadas pode ser representado em sua forma matricial:

$$\frac{d\boldsymbol{\psi}(t)}{dt} = \mathbf{M}(t)\boldsymbol{\psi}(t) + \mathbf{Q}(t - \tau(t)), \quad (6.23)$$

onde \mathbf{M} é uma matriz em blocos de dimensão $(G + I) \times (N - 1)$, $\boldsymbol{\psi}(t)$ é uma matriz coluna com os fluxos e precursores semi-discretizados, e $\mathbf{Q}(t - \tau(t))$ é uma matriz coluna que representa um termo fonte. Eles são dados por

$$\mathbf{M}(t) = \begin{bmatrix} v_1 (\mathbf{D}_1 + \mathbf{T}_{1,1}) & \cdots & v_1 \mathbf{T}_{1,G} & v_1 \mathbf{P}_{1,1}^f & \cdots & v_1 \mathbf{P}_{1,I}^f \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_G \mathbf{T}_{G,1} & \cdots & v_G (\mathbf{D}_G + \mathbf{T}_{G,G}) & v_G \mathbf{P}_{G,1}^f & \cdots & v_G \mathbf{P}_{G,I}^f \\ \mathbf{F}_{1,1}^p & \cdots & \mathbf{F}_{1,G}^p & \mathbf{P}_1(t) & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{F}_{I,1}^p & \cdots & \mathbf{F}_{I,G}^p & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{P}_I(t) \end{bmatrix}, \quad (6.24a)$$

$$\boldsymbol{\psi}(t) = \left[\phi_1(t), \dots, \phi_g(t), \dots, \phi_G(t), \mathbf{C}_1(t), \dots, \mathbf{C}_i(t), \dots, \mathbf{C}_I(t) \right]^\top, \quad (6.24b)$$

$$\phi_g(t) = \left[\phi_{g,1}(t), \dots, \phi_{g,j}(t), \dots, \phi_{g,N-1}(t) \right]^\top, \quad (6.24c)$$

$$\mathbf{C}_i(t) = \left[C_{i,1}(t), \dots, C_{i,j}(t), \dots, C_{i,N-1}(t) \right]^\top, \quad (6.24d)$$

$$\mathbf{Q}(t - \tau(t)) = \frac{u(t)}{\Delta z} \left[\mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}, \dots, \mathbf{0}, \xi_1(t) \mathbf{C}_{1,N}(t - \tau(t)), \dots, \xi_i(t) \mathbf{C}_{i,N}(t - \tau(t)), \dots, \xi_I(t) \mathbf{C}_{I,N}(t - \tau(t)) \right]^\top, \quad (6.24e)$$

$$\mathbf{C}_{i,N}(t - \tau(t)) = \left[C_{i,N}(t - \tau(t)), 0, \dots, 0 \right]^\top, \quad (6.24f)$$

e os blocos \mathbf{D}_g , $\mathbf{P}_i(t)$, $\mathbf{T}_{g,g'}$, $\mathbf{P}_{g,i}^f$ e $\mathbf{F}_{i,g}^p$ são matrizes de dimensão $(N - 1)$:

$$\mathbf{D}_g \equiv \begin{bmatrix} -2\frac{D_g}{\Delta z^2} & \frac{D_g}{\Delta z^2} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{D_g}{\Delta z^2} & -2\frac{D_g}{\Delta z^2} & \frac{D_g}{\Delta z^2} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{D_g}{\Delta z^2} & -2\frac{D_g}{\Delta z^2} & \frac{D_g}{\Delta z^2} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{D_g}{\Delta z^2} & -2\frac{D_g}{\Delta z^2} \end{bmatrix} \quad (6.25a)$$

$$\mathbf{P}_i(t) \equiv \begin{bmatrix} -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{u(t)}{\Delta z} & -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{u(t)}{\Delta z} & -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{u(t)}{\Delta z} & -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i \end{bmatrix} \quad (6.25b)$$

$$\mathbf{T}_{g,g'} \equiv \begin{cases} \left[(1 - \beta)\chi_g \nu \Sigma_{f,g} - \Sigma_{R,g} \right] \mathbf{I}_{\mathbf{N}-1}, & \text{se } g = g', \\ \left[(1 - \beta)\chi_g \nu \Sigma_{f,g'} + \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \right] \mathbf{I}_{\mathbf{N}-1}, & \text{se } g \neq g', \end{cases} \quad (6.25c)$$

$$\mathbf{P}_{g,i}^f \equiv \chi_{i,g} \lambda_i \mathbf{I}_{\mathbf{N}-1}, \quad (6.25d)$$

$$\mathbf{F}_{i,g}^p \equiv \beta_i \nu \Sigma_{f,g} \mathbf{I}_{\mathbf{N}-1}. \quad (6.25e)$$

Foi mantida a dependência temporal apenas na matriz \mathbf{P}_i por possuir em seus elementos a velocidade de escoamento, que consideraremos que poderá variar ao longo do transiente. Nas outras matrizes, consideramos que os parâmetros nucleares variam instantaneamente de um valor x_0 pré-transiente para um valor x após o início do transiente, logo não variando durante o transiente. No entanto, esse método é facilmente generalizado para considerar a variação temporal de qualquer parâmetro nuclear.

6.2.2 Integração Numérica no Tempo

Para obtermos uma relação entre $C_{i,N}(t)$ e $C_{i,N-1}(t)$, podemos integrar numericamente a equação (6.21) pelo método de Euler implícito [49]:

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{dC_{i,N}(t)}{dt} dt = - \int_{t_{n-1}}^{t_n} \left[\frac{u(t)}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,N}(t) dt + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{u(t)}{\Delta z} C_{i,N-1}(t) dt,$$

$$C_{i,N}^n - C_{i,N}^{n-1} = - \left[\frac{u_n}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,N}^n \Delta t + \frac{u_n}{\Delta z} C_{i,N-1}^n \Delta t, \quad (6.26)$$

$$C_{i,N}^n = \left[1 + u_n \frac{\Delta t}{\Delta z} + \lambda_i \Delta t \right]^{-1} \left[C_{i,N}^{n-1} + u_n \frac{\Delta t}{\Delta z} C_{i,N-1}^n \right],$$

onde $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ é o passo temporal e o índice n indica a função avaliada no instante t_n : $C_{i,j}^n \equiv C_{i,j}(t_n)$ e $u_n \equiv u(t_n)$.

Para resolvermos a equação (6.23) usaremos o método de Crank-Nicolson [49], que é equivalente a integrar numericamente a equação pelo método dos trapézios:

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} \frac{d\psi(t)}{dt} dt = \int_{t_{n-1}}^{t_n} \mathbf{M}\psi(t) dt + \int_{t_{n-1}}^{t_n} \mathbf{Q}(t - \tau(t)) dt, \quad (6.27)$$

$$\psi^n - \psi^{n-1} \approx \frac{\mathbf{M}^n \psi^n + \mathbf{M}^{n-1} \psi^{n-1}}{2} \Delta t + \frac{\mathbf{Q}^{n-p_n} + \mathbf{Q}^{n-1-p_n}}{2} \Delta t,$$

sendo $p_n \equiv \tau(t_n)/\Delta t$. Se p não for um número inteiro, o vetor \mathbf{Q}^{n-p_n} é interpolado linearmente da seguinte maneira:

$$\mathbf{Q}^{n-p_n} = (n - p_n - m) \mathbf{Q}^{m+1} - (n - p_n - m - 1) \mathbf{Q}^m, \quad (6.28)$$

onde m é o maior número inteiro menor que $n - p_n$ ($m \equiv \lfloor n - p_n \rfloor$). Se $p_n > n$, temos que $\mathbf{Q}^{n-p_n} = \mathbf{Q}^0$. Vale ressaltar que essa interpolação requer que o passo temporal Δt seja menor que o tempo de circulação $\tau(t)$.

Explicitando ψ^n na equação (6.27), obtemos

$$\psi^n = \left[\frac{2}{\Delta t} \mathbf{I} - \mathbf{M}^n \right]^{-1} \left\{ \left[\frac{2}{\Delta t} \mathbf{I} + \mathbf{M}^{n-1} \right] \psi^{n-1} + \mathbf{Q}^{n-p_n} + \mathbf{Q}^{n-1-p_n} \right\}, \quad (6.29)$$

sendo \mathbf{I} a matriz identidade de mesma dimensão que \mathbf{M} . A cada passo temporal, ψ^n será calculado pela equação (6.29). Em seguida, calcula-se $C_{i,N}^n$ pela equação (6.26), e $C_{i,0}^n$ pela condição de contorno $C_{i,0}^n = \xi_i^n C_{i,N}^{n-p_n}$.

6.3 Equações da cinética pontual

Nesta seção detalhamos o cálculo numérico dos fatores de amplitude, que são calculados pelas equações (4.12a) e (4.12b) da cinética pontual, e o método de atualização das formas espaciais dos precursores.

6.3.1 Cálculo dos Fatores de Amplitude

O sistema de equações da cinética pontual (Eqs. (4.12a) e (4.12b)) pode ser escrito na sua forma matricial:

$$\frac{d\boldsymbol{\psi}(t)}{dt} = \mathbf{M}(t) \boldsymbol{\psi}(t) + \mathbf{S}(t) \boldsymbol{\psi}(t - \tau), \quad (6.30)$$

onde as matrizes são definidas por

$$\mathbf{M}(t) \equiv \begin{bmatrix} \frac{\rho(t) - \hat{\beta}(t)}{\Lambda(t)} & \frac{\hat{\lambda}_1(t)}{\Lambda(t)} & \cdots & \frac{\hat{\lambda}_I(t)}{\Lambda(t)} \\ \frac{\hat{\beta}_1(t)}{\Lambda_1(t)} & -\frac{\gamma_1(t)}{\Lambda_1(t)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\hat{\beta}_I(t)}{\Lambda_I(t)} & 0 & \cdots & -\frac{\gamma_I(t)}{\Lambda_I(t)} \end{bmatrix}, \quad (6.31a)$$

$$\gamma_i(t) \equiv \hat{\lambda}_i(t) + \mu_i(t) + \eta_i(t), \quad (6.31b)$$

$$\mathbf{S}(t) \equiv \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_1(t)}{\Lambda_1(t)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{\sigma_I(t)}{\Lambda_I(t)} \end{bmatrix}, \quad (6.31c)$$

$$\boldsymbol{\psi}(t) \equiv \left[P(t), G_1(t), \dots, G_i(t), \dots, G_I(t) \right]^T, \quad (6.31d)$$

$$\boldsymbol{\psi}(0) \equiv \left[1, 1, \dots, 1, \dots, 1 \right]^T. \quad (6.31e)$$

A equação matricial (6.30) pode ser resolvida pelo método de Crank-Nicolson [49], com passo temporal Δt :

$$\boldsymbol{\psi}^n = \left[\frac{2}{\Delta t} \mathbf{I} - \mathbf{M}^n \right]^{-1} \left\{ \left[\frac{2}{\Delta t} \mathbf{I} + \mathbf{M}^{n-1} \right] \boldsymbol{\psi}^{n-1} + \mathbf{S}^n \boldsymbol{\psi}^{n-p_n} + \mathbf{S}^{n-1} \boldsymbol{\psi}^{n-1-p_n} \right\}. \quad (6.32)$$

Novamente, o índice n indica o termo avaliado no instante t_n , \mathbf{I} é a matriz identidade de mesma ordem que \mathbf{M} ($I + 1$), e $p_n \equiv \tau(t_n)/\Delta t$. Quando p_n não for um número inteiro, tanto $\tilde{C}_i^{n-p_n}(H)$, que aparece dentro da matriz \mathbf{S}^n , e $\boldsymbol{\psi}^{n-p_n}$ são interpolados linearmente:

$$\tilde{C}_i^{n-p_n}(H) = (n - p_n - m) \tilde{C}_i^{m+1}(H) - (n - p_n - m - 1) \tilde{C}_i^m(H), \quad (6.33a)$$

$$\boldsymbol{\psi}^{n-p_n} = (n - p_n - m) \boldsymbol{\psi}^{m+1} - (n - p_n - m - 1) \boldsymbol{\psi}^m, \quad (6.33b)$$

onde m é o maior número inteiro menor que $n - p_n$. Se $p_n > n$, então $\boldsymbol{\psi}^{n-p_n} = \boldsymbol{\psi}^0$ e $\tilde{C}_i^{n-p_n}(H) = \tilde{C}_i^0(H) = C_i^0(H)$. Lembrando que para fazer essa interpolação é necessário que o passo temporal Δt seja menor que $\tau(t)$, ou seja, $p_n \geq 1$ para todo n .

6.3.2 Atualização da Forma Espacial dos Precursores e dos Parâmetros Cinéticos

A forma espacial dos precursores é calculada a partir da equação (2.2b) usando o método de diferenças finitas, de forma similar ao que foi feito no caso estacionário. A discretização é feita com um passo temporal maior:

$$\Delta T \equiv s \Delta t, \quad (6.34)$$

onde Δt é o passo temporal que é usado para o cálculo dos fatores de amplitude, e s é o número de passos nos quais resolvem-se as equações da cinética pontual entre dois cálculos consecutivos da forma espacial. A notação $s = \infty$ será usada para indicar os casos onde não há atualização da forma espacial dos precursores.

É possível usar um passo temporal maior devido à diferença entre as escalas de tempo entre os diferentes fenômenos. A variação temporal do fator de amplitude dos precursores, $G_i(t)$, esta associada à rápida variação da população de nêutrons no núcleo, enquanto que a variação de sua forma espacial está associada com o movimento dos precursores causado pelo escoamento do combustível.

A diferença entre essas escalas de tempo é importante para esse método para que não se perca eficiência computacional [36]. Se usássemos o mesmo passo temporal, o tempo de cálculo ficaria da mesma ordem de magnitude do cálculo numérico

da cinética espacial, perdendo, assim, a grande vantagem da cinética pontual, que é seu baixo tempo de cálculo.

Lembrando a forma discretizada da equação dos precursores dada pela equação (6.18b),

$$\frac{dC_{i,j}(t)}{dt} = - \left[\frac{u(t)}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,j}(t) + \frac{u(t)}{\Delta z} C_{i,j-1}(t) + \beta_i \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'} \phi_{g',j}(t), \quad (6.35)$$

e avaliando em $j = 1$, também usando a condição de contorno dos precursores (6.19c), obtemos

$$\frac{dC_{i,1}(t)}{dt} = - \left[\frac{u(t)}{\Delta z} + \lambda_i \right] C_{i,1}(t) + \frac{u(t)}{\Delta z} \xi_i(t) C_{i,N}(t - \tau(t)) + \beta_i \sum_{g=1}^G \nu \Sigma_{f,g} \phi_{g,1}(t). \quad (6.36)$$

Combinando a segunda equação, que é relativa a $j = 1$, com a primeira, que é relativa a $j = 2, \dots, N$, obtemos um sistema de N equações que pode ser escrito em sua forma matricial:

$$\frac{d\mathbf{C}_i}{dt} = \mathbf{P}_i(t) \mathbf{C}_i(t) + \mathbf{F}_i P(t) + \mathbf{Q}_i(t - \tau(t)), \quad (6.37)$$

onde foi feita a separação de variáveis no fluxo de nêutrons, $\phi_{g,j}(t) = \phi_{g,j}^0 P(t)$. As matrizes são definidas por

$$\mathbf{P}_i(t) \equiv \begin{bmatrix} -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{u(t)}{\Delta z} & -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{u(t)}{\Delta z} & -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{u(t)}{\Delta z} & -\frac{u(t)}{\Delta z} - \lambda_i \end{bmatrix} \quad (6.38a)$$

$$\mathbf{F}_i \equiv \beta_i \sum_{g=1}^G \nu \Sigma_{f,g} \left[\phi_{g,1}^0, \dots, \phi_{g,j}^0, \dots, \phi_{g,N-1}^0, 0 \right]^T, \quad (6.38b)$$

$$\mathbf{C}_i(t) \equiv \left[C_{i,1}(t), \dots, C_{i,j}(t), \dots, C_{i,N}(t) \right]^T, \quad (6.38c)$$

$$\mathbf{Q}_i(t - \tau(t)) \equiv \frac{u(t)}{\Delta z} \xi_i(t) \left[C_{i,N}(t - \tau(t)), 0, \dots, 0, \dots, 0 \right]^T. \quad (6.38d)$$

Resolvendo a equação (6.37) pelo método de Crank-Nicolson com passo temporal ΔT , obtemos

$$\mathbf{C}_i^n = \left[\frac{2}{\Delta T} \mathbf{I} - \mathbf{P}_i^n \right]^{-1} \left\{ \left[\frac{2}{\Delta T} \mathbf{I} + \mathbf{P}_i^{n-s} \right] \mathbf{C}_i^{n-s} + \mathbf{F}_i \left[P^n + P^{n-s} \right] + \mathbf{Q}_i^{n-p_n} + \mathbf{Q}_i^{n-s-p_n} \right\}. \quad (6.39)$$

Nesta equação, os limites de integração são t_{n-s} e t_n pois o passo temporal usado foi ΔT , ou seja, s vezes o passo temporal Δt . A matriz \mathbf{I} é a matriz identidade com a mesma dimensão que $\mathbf{P}_i(t)$, ou seja, de ordem N .

Agora, separando as variáveis da concentração de precursores (equação (4.8b)), obtemos a equação usada para atualizar a forma espacial dos precursores:

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{C}}_i^n &= \left[\frac{2}{\Delta T} \mathbf{I} - \mathbf{P}_i^n \right]^{-1} \left\{ \left[\frac{2}{\Delta T} \mathbf{I} + \mathbf{P}_i^{n-s} \right] \tilde{\mathbf{C}}_i^{n-s} G_i^{n-s} \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{F}_i \left[P^n + P^{n-s} \right] + \mathbf{Q}_i^{n-p_n} + \mathbf{Q}_i^{n-s-p_n} \right\} \frac{1}{G_i^n}, \end{aligned} \quad (6.40)$$

onde:

$$\tilde{\mathbf{C}}_i^n \equiv \left[\tilde{C}_{i,1}^n, \dots, \tilde{C}_{i,j}^n, \dots, \tilde{C}_{i,N}^n \right]^\top, \quad (6.41a)$$

$$\tilde{\mathbf{C}}_i^0 \equiv \left[C_{i,1}^0, \dots, C_{i,j}^0, \dots, C_{i,N}^0 \right]^\top, \quad (6.41b)$$

$$\mathbf{Q}_i^{n-p_n} = \frac{u_n}{\Delta z} \xi_i^n \left[\tilde{C}_{i,N}^{n-p_n} G_i^{n-p_n}, 0, \dots, 0 \right]^\top, \quad (6.41c)$$

com o valor dos precursores na entrada do reator ($j = 0$) calculados por

$$C_{i,0}^n = \xi_i^n C_{i,N}^{n-p}, \quad (6.42a)$$

$$\tilde{C}_{i,0}^n G_i^n = \xi_i^n \tilde{C}_{i,N}^{n-p_n} G_i^{n-p_n}, \quad (6.42b)$$

$$\tilde{C}_{i,0}^n = \frac{G_i^{n-p_n}}{G_i^n} \xi_i^n \tilde{C}_{i,N}^{n-p_n}, \quad (6.42c)$$

sendo as equações válidas para $i = 1, \dots, I$.

Para satisfazer a normalização dada pela equação (4.10), a forma espacial $\tilde{C}_i^m(z)$ e o fator de amplitude G_i^m devem ser multiplicado e dividido, respectivamente, por um fator de normalização $F_{N,i}(t_n)$, dado por

$$F_{N,i}(t_n) \equiv \frac{\int_0^H C_i^*(z) C_i^0(z) dz}{\int_0^H C_i^*(z) \tilde{C}_i(z, t_n) dz}, \quad (6.43)$$

onde essas integrais podem ser resolvidas numericamente pelo método dos trapézios [49].

Nos instantes $t_n, t_{n+1}, \dots, t_{n+(s-1)}$, a forma espacial dos precursores \tilde{C}_i^n se mantém constante, até que seja atualizada de novo no instante t_{n+s} . Os parâmetros cinéticos são atualizados usando a forma espacial e também mantêm-se constantes no intervalo entre duas atualizações consecutivas. A figura 6.1 mostra o fluxograma que representa o algoritmo numérico que foi usado nesta seção.

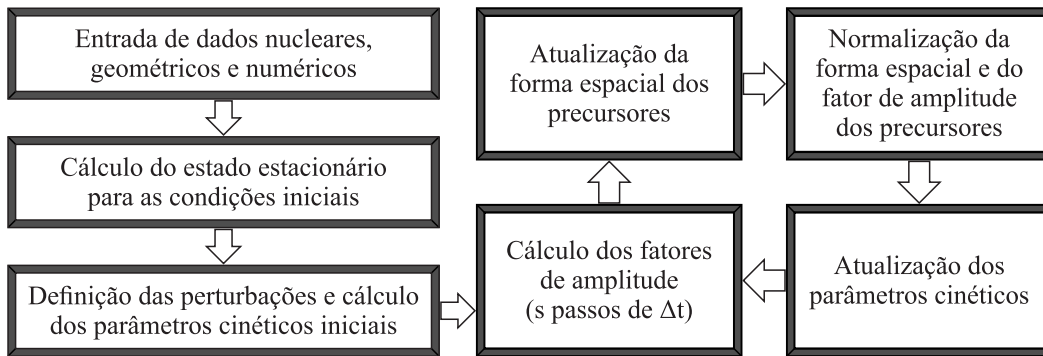


Figura 6.1: Fluxograma do algoritmo numérico.

6.4 Equações da cinética inversa

As equações da cinética inversa serão resolvidas numericamente nas próximas subseções. O caso geral, onde todos os parâmetros possuem dependência temporal, é resolvido de forma similar à cinética pontual pelo método de diferenças finitas, e também resolvido a partir de sua solução semi-analítica. Já no caso da aproximação de parâmetros constantes, será detalhado o método para resolver a integração numérica presente em sua solução. Em todos os casos, há atualização da forma espacial dos precursores, que é feita da mesma forma como foi descrita na subseção 6.3.2.

6.4.1 Aproximação de parâmetros constantes

No caso de aproximação de parâmetros constantes, vimos na seção 5.2 do capítulo 5 que a solução é dada pela equação (5.39):

$$G_i(t) = \frac{H_0(t)}{2} e^{\alpha_0 t} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[\text{Re}(H_k(t)) \cos(\beta_k t) - \text{Im}(H_k(t)) \sin(\beta_k t) \right] e^{\alpha_k t}, \quad (6.44)$$

onde

$$A \equiv \frac{\hat{\lambda}_i + \mu_i + \eta_i}{\Lambda_i}, \quad (6.45a)$$

$$A_d \equiv \frac{\sigma_i}{\Lambda_i}, \quad (6.45b)$$

$$A_f \equiv \frac{\hat{\beta}_i}{\Lambda_i}, \quad (6.45c)$$

$$\alpha_k \equiv \frac{1}{\tau} \operatorname{Re} \left(W_k(A_d \tau e^{A\tau}) \right) - A, \quad (6.45d)$$

$$\beta_k \equiv \frac{1}{\tau} \operatorname{Im} \left(W_k(A_d \tau e^{A\tau}) \right), \quad (6.45e)$$

$$H_k(t) \equiv \frac{2}{1 + A_d \tau e^{-r_k \tau}} \left[1 + \frac{A_d}{r_k} (1 - e^{-r_k \tau}) + A_f \int_0^t P(t') e^{-r_k t'} dt' \right]. \quad (6.45f)$$

Quando a forma do fator de amplitude $P(t)$ for tal que a integral presente no termo $H_k(t)$ não possa ser calculada analiticamente, precisamos resolvê-la numericamente. Denominando essa integral de $I_k(t)$, definido por

$$I_k(t) \equiv \int_0^t P(t') e^{-r_k t'} dt', \quad (6.46)$$

podemos resolvê-la pelo método dos trapézios, obtendo

$$I_k(t_n) \approx P(t_0) e^{-r_k t_0} \frac{\Delta t}{2} + \sum_{m=1}^{n-1} P(t_m) e^{-r_k t_m} \Delta t + P(t_n) e^{-r_k t_n} \frac{\Delta t}{2}, \quad (6.47)$$

e como temos que $t_0 = 0$ e $P(0) = 1$, a expressão simplifica-se para

$$I_k^n = \frac{\Delta t}{2} + \sum_{m=1}^{n-1} P^m e^{-r_k t_m} \Delta t + P^n e^{-r_k t_n} \frac{\Delta t}{2}. \quad (6.48)$$

Avaliando $I_k(t)$ em $t = t_{n-1}$, obtemos

$$I_k^{n-1} = \frac{\Delta t}{2} + \sum_{m=1}^{n-2} P^m e^{-r_k t_m} \Delta t + P^{n-1} e^{-r_k t_{n-1}} \frac{\Delta t}{2}, \quad (6.49)$$

e somando $P^{n-1} \exp(-r_k t_{n-1}) \Delta t / 2$ nos dois lados da equação, podemos incluir o último termo resultante do lado direito da equação no somatório, estendendo-o para até $n - 1$:

$$I_k^{n-1} + P^{n-1} e^{-r_k t_{n-1}} \frac{\Delta t}{2} = \frac{\Delta t}{2} + \sum_{m=1}^{n-1} P^m e^{-r_k t_m} \Delta t. \quad (6.50)$$

Assim, I_k^n pode ser escrito em termos de I_k^{n-1} :

$$I_k^n = I_k^{n-1} + \frac{\Delta t}{2} \left[P^{n-1} e^{-r_k t_{n-1}} + P^n e^{-r_k t_n} \right], \quad (6.51)$$

sendo que $I_k^0 = 0$ por definição.

Essa expressão de I_k^n é importante para que aproveitemos o cálculo da integral feito no passo anterior e evitar que a cada passo sejam calculados $n - 2$ termos desnecessários, tornando assim o cálculo computacional da solução mais eficiente.

A expressão para H_k^n fica, então:

$$H_k^n = \frac{2}{1 + A_d \tau e^{-r_k \tau}} \left[1 + \frac{A_d}{r_k} (1 - e^{-r_k \tau}) + A_f I_k^n \right], \quad (6.52)$$

que é substituída na solução de G_i^n :

$$G_i^n = \frac{H_0^n}{2} e^{\alpha_0 t_n} + \sum_{k=1}^{\infty} \left[\operatorname{Re}(H_k^n) \cos(\beta_k t_n) - \operatorname{Im}(H_k^n) \sin(\beta_k t_n) \right] e^{\alpha_k t_n}, \quad (6.53)$$

Essa expressão é, por sua vez, substituída na reatividade $\rho(t)$, dada pela equação (5.1), e que avaliada em $t = t_n$ fica

$$\rho^n = \hat{\beta} + \frac{\Lambda}{P^n} \left(\frac{dP}{dt} \right)^n - \frac{1}{P^n} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i G_i^n, \quad (6.54)$$

sendo a derivada do fator de amplitude $P(t)$ discretizada pelo método de diferenças finitas atrasadas:

$$\left(\frac{dP}{dt} \right)^n \approx \frac{P^n - P^{n-1}}{\Delta t}. \quad (6.55)$$

Para calcular numericamente o somatório infinito presente na equação (6.53), é necessário truncá-lo após um certo número N_k de termos. Assim, precisaremos calcular N_k integrais numéricas a cada passo temporal, o que torna a solução numérica desta aproximação ineficiente, pois o número N_k de termos do somatório precisa ser relativamente grande, que nossos testes mostraram ser em torno de 100. Nas simulações feitas nesse trabalho, a solução numérica do caso sem aproximação demandou um menor tempo computacional que esta solução analítica para o caso com aproximação. Dessa forma, nos resultados serão apresentados apenas os casos sem aproximação, cujos métodos serão descritos nas próximas sub-seções.

6.4.2 Caso geral: solução por diferenças finitas

As equações da cinética inversa, mantendo a dependência temporal de todos os parâmetros, são dadas pelas equações (5.1) e (5.2):

$$\rho(t) = \hat{\beta}(t) + \frac{\Lambda(t)}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{1}{P(t)} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i(t) G_i(t), \quad (6.56a)$$

$$\Lambda_i(t) \frac{dG_i(t)}{dt} = \hat{\beta}_i(t) P(t) - \left[\hat{\lambda}_i(t) + \mu_i(t) + \eta_i(t) \right] G_i(t) + \sigma_i(t) G_i(t - \tau(t)). \quad (6.56b)$$

A equação da reatividade avaliada no instante t_n é dada por

$$\rho^n = \hat{\beta}^n + \frac{\Lambda^n}{P^n} \left(\frac{dP}{dt} \right)^n - \frac{1}{P^n} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i^n G_i^n. \quad (6.57)$$

Para calcularmos G_i^n , discretizamos a equação (6.56b) pelo método de Crank-Nicolson:

$$\begin{aligned} \frac{G_i^n - G_i^{n-1}}{\Delta t} &= \frac{1}{2} \left[\frac{\hat{\beta}_i^n P^n}{\Lambda_i^n} + \frac{\hat{\beta}_i^{n-1} P^{n-1}}{\Lambda_i^{n-1}} \right] - \frac{1}{2} \left[\frac{\gamma_i^n G_i^n}{\Lambda_i^n} + \frac{\gamma_i^{n-1} G_i^{n-1}}{\Lambda_i^{n-1}} \right] \\ &+ \frac{1}{2} \left[\frac{\sigma_i^n G_i^{n-p_n}}{\Lambda_i^n} + \frac{\sigma_i^{n-1} G_i^{n-1-p_n}}{\Lambda_i^{n-1}} \right], \end{aligned} \quad (6.58)$$

e que resolvendo para G_i^n , obtemos

$$\begin{aligned} G_i^n &= \left[\frac{2}{\Delta t} + \frac{\gamma_i^n}{\Lambda_i^n} \right]^{-1} \left\{ \left[\frac{2}{\Delta t} - \frac{\gamma_i^{n-1}}{\Lambda_i^{n-1}} \right] G_i^{n-1} + \frac{\hat{\beta}_i^n P^n}{\Lambda_i^n} + \frac{\hat{\beta}_i^{n-1} P^{n-1}}{\Lambda_i^{n-1}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sigma_i^n G_i^{n-p_n}}{\Lambda_i^n} + \frac{\sigma_i^{n-1} G_i^{n-1-p_n}}{\Lambda_i^{n-1}} \right\}, \end{aligned} \quad (6.59)$$

onde $\gamma_i^n \equiv \hat{\lambda}_i^n + \mu_i^n + \eta_i^n$ e $G_i^{n-p_n}$ é obtido por interpolação linear da mesma forma como descrita na subseção 6.3.2.

A atualização da forma espacial dos precursores e dos parâmetros cinéticos é feita exatamente da mesma forma que foi demonstrada na subseção 6.3.2: após s passos temporais Δt calculando o fator de amplitude G_i^n , recalculamos a forma espacial dos precursores e a usamos para atualizar os parâmetros cinéticos, que vão se manter constantes até passarem-se outros s passos temporais e serem atualizados novamente.

Substituindo a expressão de G_i^n na equação (6.57) e aproximando a derivada dP^n/dt por diferenças finitas atrasadas, obtemos a expressão final da reatividade:

$$\begin{aligned} \rho^n = & \hat{\beta}^n + \frac{\Lambda^n}{P^n} \frac{P^n - P^{n-1}}{\Delta t} - \frac{1}{P^n} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i^n \left[\frac{2}{\Delta t} + \frac{\gamma_i^n}{\Lambda_i^n} \right]^{-1} \left\{ \left[\frac{2}{\Delta t} - \frac{\gamma_i^{n-1}}{\Lambda_i^{n-1}} \right] G_i^{n-1} \right. \\ & \left. + \frac{\hat{\beta}_i^n P^n}{\Lambda_i^n} + \frac{\hat{\beta}_i^{n-1} P^{n-1}}{\Lambda_i^{n-1}} + \frac{\sigma_i^n G_i^{n-p_n}}{\Lambda_i^n} + \frac{\sigma_i^{n-1} G_i^{n-1-p_n}}{\Lambda_i^{n-1}} \right\}. \end{aligned} \quad (6.60)$$

6.4.3 Caso geral: solução semi-analítica

Após obtermos a solução semi-analítica dada pela equação (5.11), precisamos calcular numericamente as integrais que aparecem na solução. A solução é dada por

$$G_i(t) = \left\{ 1 + \int_0^t Q_i(t') e^{R_i(t')} dt' \right\} e^{-R_i(t)}, \quad (6.61)$$

onde

$$Q_i(t) = A_f(t)P(t) + A_d(t)G_i(t - \tau(t)), \quad (6.62a)$$

$$A(t) \equiv \frac{\hat{\lambda}_i(t) + \mu_i(t) + \eta_i(t)}{\Lambda_i(t)}, \quad (6.62b)$$

$$A_d(t) \equiv \frac{\sigma_i(t)}{\Lambda_i(t)}, \quad (6.62c)$$

$$A_f(t) \equiv \frac{\hat{\beta}_i(t)}{\Lambda_i(t)}, \quad (6.62d)$$

$$R_i(t) \equiv \int_0^t A(t') dt'. \quad (6.62e)$$

Primeiro, precisamos encontrar o termo $R_i(t)$ do fator integrante. Resolvendo a integral pelo método dos trapézios da mesma forma como foi feito anteriormente, obtemos:

$$R_i^n = R_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{2} [A^{n-1} + A^n], \quad (6.63)$$

com $R_i^0 = R_i(0) = 0$ pela própria definição.

Agora, definindo como $J_i(t)$ a integral presente na expressão de $G_i(t)$,

$$J_i(t) \equiv \int_0^t Q_i(t') e^{R_i(t')} dt', \quad (6.64)$$

aplicando o método dos trapézios obtemos

$$J_i^n = J_i^{n-1} + \frac{\Delta t}{2} [Q_i^{n-1} e^{R_i^{n-1}} + Q_i^n e^{R_i^n}], \quad (6.65)$$

onde $J_i^0 = 0$ e Q_i^n é dado por

$$Q_i^n = A_f^n P^n + A_d^n G_i^{n-p_n}, \quad (6.66)$$

com o termo $G_i^{n-p_n}$ sendo calculado por interpolação linear. Substituindo J_i^n na expressão para G_i^n , temos

$$G_i^n = \left(1 + J_i^n\right) e^{-R_i^n}, \quad (6.67)$$

e quando substituído na equação (6.57), obtemos a expressão final para a reatividade no instante t_n :

$$\rho^n = \hat{\beta}^n + \frac{\Lambda^n}{P^n} \frac{P^n - P^{n-1}}{\Delta t} - \frac{1}{P^n} \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_i^n \left(1 + J_i^n\right) e^{-R_i^n}. \quad (6.68)$$

Capítulo 7

Resultados

Os resultados deste trabalho consistem na aplicação das equações da cinética inversa a alguns transientes de interesse do reator a sal fundido. Dois transientes foram escolhidos: no primeiro, consideramos uma variação linear no nível de potência relativa do reator para um novo patamar, e, após um determinado intervalo mantendo constante essa potência, consideramos outra variação para um novo nível. No segundo transiente, consideramos uma queda da velocidade de escoamento do combustível e determinamos a variação de reatividade necessária para manter o reator crítico, e, a partir disso, podemos encontrar as regiões de sub e supercriticalidade do reator, que são importantes para o seu controle.

Antes de apresentar esses resultados, primeiro fazemos alguns testes de consistência das equações da cinética inversa. Estes testes são necessários para verificarmos se o nosso modelo de cinética inversa desenvolvido reproduz, de fato, o problema inverso da cinética pontual. Além disso, também garante que o método numérico usado na solução da cinética inversa tenha precisão adequada, visto que o método utilizado na cinética pontual foi previamente validado por Diniz *et al.* [36]

7.1 Testes para as equações da cinética inversa

Os testes feitos consistem em comparar as entradas e soluções das equações da cinética pontual (ECP) e inversa (ECI) umas com as outras. Descrevendo de forma mais detalhada, no primeiro teste, esquematizado na figura 7.1, as ECP são usadas para calcular a variação do fator de amplitude do fluxo, $P(t)$, em função de

uma reatividade externa usada como entrada, ρ_{in} . Após isso, o fator de amplitude calculado é utilizado como entrada nas ECI para determinar a variação de reatividade, $\rho_{ci}(t)$, que então é comparada com a reatividade inicial ρ_{in} . Em ambos os casos, é considerada a mesma variação na velocidade de escoamento $u(t)$.

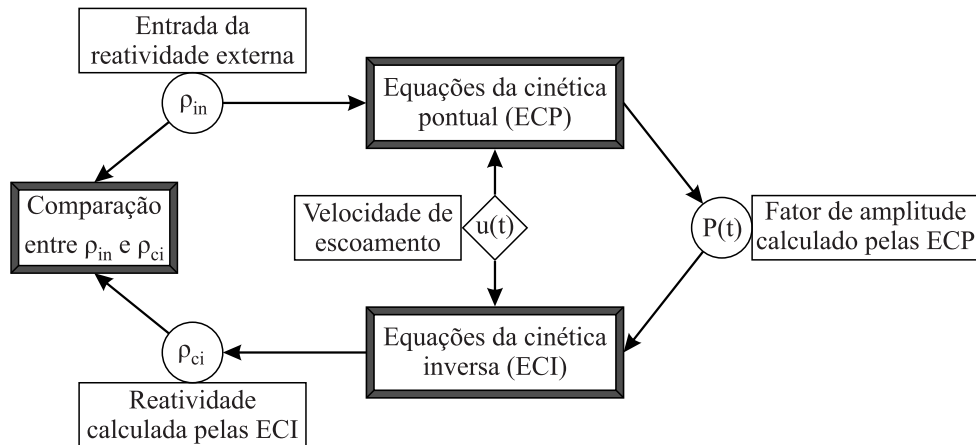


Figura 7.1: Esquema do primeiro teste.

O segundo teste, esquematizado na figura 7.2, consiste em usar as ECI para calcular a variação de reatividade necessária, $\rho(t)$, para causar uma dada variação do fator de amplitude do fluxo, $P_{in}(t)$. Essa reatividade é, então, usada nas ECP para calcular o fator de amplitude resultante, $P_{cp}(t)$, que é comparado com o inicial para determinar o desvio causado pelos possíveis erros do modelo e das soluções numéricas utilizadas. Novamente, considera-se a mesma variação na velocidade de escoamento nos dois casos.

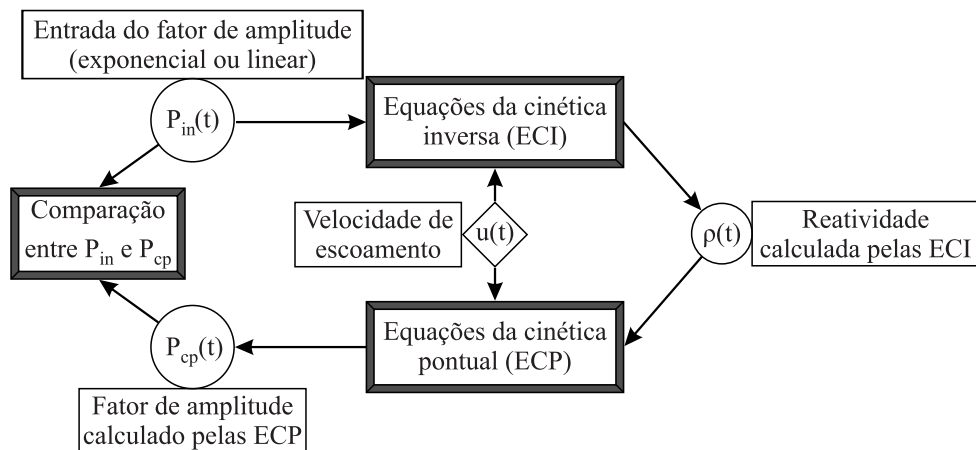


Figura 7.2: Esquema do segundo teste.

Em ambos os testes consideramos, por simplicidade, apenas um grupo de energia dos nêutrons e uma família de precursores. Os parâmetros usados para o reator encontram-se na tabela 7.1, além dos parâmetros numéricos, como passos temporais e tamanho da malha para atualização da forma espacial dos precursores.

Tabela 7.1: Parâmetros do reator.

Parâmetros	Valores	Parâmetros	Valores
D	0.80 cm	β	617.2 pcm
Σ_a	0.0168 cm^{-1}	λ	0.0848 s^{-1}
Σ_f	0.0060 cm^{-1}	H	300 cm
ν	2.8195	L	300 cm
v	$2.2 \times 10^5 \text{ cm/s}$	Δz	0.5 cm
Δt	0.001 s	ΔT	0.01 s

Nas simulações feitas neste trabalho, o tempo computacional gasto pela solução semi-analítica e pelo método de diferenças finitas para resolver as ECI (subseções 6.4.2 e 6.4.3) são aproximadamente iguais, além de possuírem a mesma precisão. Dessa forma, foi escolhido usar o método de diferenças finitas em todos os testes.

7.1.1 Teste 1: reatividade inicial constante

Neste primeiro teste, consideraremos duas perturbações na seção de choque macroscópica de absorção, Σ_a , dados pela tabela 7.2. Essas perturbações representam reatividades em torno de -200 pcm e 100 pcm, com pequenas diferenças da ordem de centésimos de pcm. Este tipo de perturbação simula, por exemplo, uma movimentação das barras de controle, mas com uma aproximação de variação instantânea da reatividade do reator. Além disso, foram consideradas duas variações na velocidade de escoamento $u(t)$: uma diminuição exponencial com constante de decaimento $\kappa = 0.5 \text{ s}^{-1}$ [17],

$$u(t) = (u_0 - u_f)e^{-\kappa t} + u_f, \quad (7.1)$$

e um aumento linear durante um intervalo de $T_p = 5$ s,

$$u(t) = \begin{cases} \frac{u_f - u_0}{T_p} t + u_0, & \text{se } 0 \leq t < T_p, \\ u_f, & \text{se } t \geq T_p. \end{cases} \quad (7.2)$$

Tabela 7.2: Perturbações na SCM de absorção e reatividades resultantes.

$\Delta\Sigma_a$ (cm ⁻¹)	ρ_{in} (pcm)
3.3776×10^{-5}	-200
-1.6888×10^{-5}	100

Nas tabelas 7.3 e 7.4 são apresentados os desvios máximos entre as reatividades de cada caso, definidos por:

$$\text{Desvio Máximo} \equiv \max\left(|\rho_{ci}(t_n) - \rho_{in}(t_n)|\right), \quad (7.3)$$

além de serem consideradas três diferentes velocidades iniciais e três finais, e um transiente até $t_f = 10$ s. Apesar de ser um transiente curto, os maiores erros encontram-se próximo do início, com o erro tendendo a diminuir com o tempo, tornando-se desnecessário avaliar o transiente para longos intervalos de tempo.

Tabela 7.3: Desvios máximos, em pcm, entre as reatividades ρ_{ci} e ρ_{in} , para variação exponencial da velocidade.

Reatividade ρ_{in} (pcm)	Velocidade inicial u_0 (cm/s)	Velocidade final (assintótica) u_f		
		$0.8u_0$	$0.5u_0$	$0.1u_0$
-200	1	0.0232	0.0232	0.0232
	10	0.0107	0.0096	0.0117
	100	0.0167	0.0154	0.0140
100	1	0.0095	0.0095	0.0095
	10	0.0060	0.0071	0.0101
	100	0.0084	0.0093	0.0107

Tabela 7.4: Desvios máximos, em pcm, entre as reatividades ρ_{ci} e ρ_{in} , para variação linear da velocidade.

Reatividade ρ_{in} (pcm)	Velocidade inicial u_0 (cm/s)	Velocidade final u_f		
		$2u_0$	$5u_0$	$10u_0$
-200	1	0.0232	0.0232	0.0232
	10	0.0721	0.3219	0.6065
	50	0.0350	0.1124	0.2516
100	1	0.0095	0.0095	0.0095
	10	0.0052	0.0927	0.2123
	50	0.0099	0.0191	0.0432

Como os desvios obtidos nesse teste são da ordem de décimos de pcm, que são valores desprezíveis na operação de um reator, verificamos que o modelo de cinética inversa foi capaz de determinar a reatividade do sistema com suficiente precisão.

7.1.2 Teste 2: variação do fator de amplitude do fluxo

Neste segundo teste, consideraremos quatro perfis de variação do fator de amplitude do fluxo usados como entrada, P_{in} , nas ECI: um aumento e uma diminuição exponencial, e um aumento e uma diminuição linear. As equações que descrevem esses perfis são dadas por:

$$P_{exp}(t) = P_f^{t/t_f}, \quad (7.4a)$$

$$P_{lin}(t) = (P_f - 1)\frac{t}{t_f} + 1, \quad (7.4b)$$

onde P_f é o fator de amplitude final, e t_f é o instante final do transiente.

Após calcular a reatividade $\rho_{ci}(t)$ necessária para obter cada um desses perfis de variação, ela será usada como entrada nas ECP, determinando, assim, o fator de amplitude P_{cp} , que é usado para determinar o erro em relação ao fator usado de entrada nas ECI, P_{in} , definido por:

$$\text{Erro Relativo Máximo} \equiv \max\left(\frac{|P_{cp}(t_n) - P_{in}(t_n)|}{P_{in}(t_n)}\right) \times 100\%. \quad (7.5)$$

As variações da velocidade de escoamento do combustível consideradas são as mesmas da subseção anterior.

Tabela 7.5: Erro relativo máximo, em %, entre o fator de amplitude P_{cp} calculado pelas ECP e o fator de amplitude P_{in} , para variação exponencial da velocidade.

Fator de Amplitude P_{in}	Velocidade inicial u_0 (cm/s)	Velocidade final (assintótica) u_f		
		$0.8u_0$	$0.5u_0$	$0.1u_0$
$2^{t/10}$	1	8.4×10^{-8}	1.2×10^{-7}	1.8×10^{-7}
	10	7.8×10^{-7}	1.2×10^{-6}	1.7×10^{-6}
	100	5.7×10^{-7}	7.2×10^{-7}	2.5×10^{-6}
$0.5^{t/10}$	1	3.6×10^{-8}	3.5×10^{-8}	1.1×10^{-7}
	10	4.3×10^{-7}	3.7×10^{-7}	1.2×10^{-6}
	100	1.8×10^{-7}	2.8×10^{-7}	1.5×10^{-6}
$(2 - 1)\frac{t}{10} + 1$	1	7.4×10^{-8}	1.3×10^{-7}	1.8×10^{-7}
	10	6.4×10^{-7}	1.2×10^{-6}	1.8×10^{-6}
	100	4.6×10^{-7}	7.9×10^{-7}	2.6×10^{-6}
$(0.5 - 1)\frac{t}{10} + 1$	1	3.1×10^{-8}	4.1×10^{-8}	1.1×10^{-7}
	10	4.2×10^{-7}	4.2×10^{-7}	1.2×10^{-6}
	100	1.8×10^{-7}	3.2×10^{-7}	1.5×10^{-6}

Na tabela 7.5 encontram-se os valores dos erros relativos máximos para os diversos perfis de variação do fator de amplitude e com variação exponencial da velocidade de escoamento. Na tabela 7.6, são apresentados os valores dos erros para o caso de variação linear da velocidade. Como todos os valores estão abaixo de 10^{-4} %, podemos concluir que o fator de amplitude P_{cp} possui um desvio desprezível em relação ao fator de amplitude de entrada P_{in} , ou seja, a reatividade calculada pelas ECI possui exatidão suficiente para obter o perfil desejado de variação do fator de amplitude do fluxo.

Tabela 7.6: Erro relativo máximo, em %, entre o fator de amplitude P_{cp} calculado pelas ECP e o fator de amplitude P_{in} , para variação linear da velocidade.

Fator de Amplitude P_{in}	Velocidade inicial u_0 (cm/s)	Velocidade final u_f		
		$2u_0$	$5u_0$	$10u_0$
$2^{t/10}$	1	1.4×10^{-6}	5.2×10^{-7}	1.4×10^{-6}
	10	2.6×10^{-5}	1.4×10^{-5}	2.6×10^{-5}
	50	2.4×10^{-5}	7.1×10^{-6}	2.5×10^{-5}
$0.5^{t/10}$	1	2.3×10^{-7}	8.3×10^{-7}	2.2×10^{-6}
	10	2.1×10^{-6}	1.9×10^{-5}	3.8×10^{-5}
	50	2.3×10^{-6}	1.3×10^{-5}	4.8×10^{-5}
$(2 - 1)\frac{t}{10} + 1$	1	7.6×10^{-8}	5.2×10^{-7}	1.4×10^{-5}
	10	6.0×10^{-7}	1.4×10^{-5}	2.6×10^{-5}
	50	7.5×10^{-7}	6.8×10^{-6}	2.4×10^{-5}
$(0.5 - 1)\frac{t}{10} + 1$	1	2.2×10^{-7}	8.2×10^{-7}	2.2×10^{-6}
	10	1.9×10^{-6}	1.9×10^{-5}	3.8×10^{-5}
	50	2.2×10^{-6}	1.2×10^{-5}	4.7×10^{-5}

Vale ressaltar que, apesar de serem apresentados os resultados apenas para um valor de cada parâmetro relativo ao transiente da velocidade de escoamento, $\kappa = 0.5 \text{ s}^{-1}$ e $T_p = 5 \text{ s}$, foram também testados outros valores para esses parâmetros. No entanto, os resultados se mantiveram na mesma ordem de grandeza. O mesmo foi observado quando testados diferentes valores para o instante final do transiente, t_f , e para o fator de amplitude final, P_f .

7.2 Aplicações da cinética inversa

Nesta seção, aplicaremos as equações da cinética inversa a dois transientes do MSR. Ambos são transientes nos quais o acompanhamento da reatividade do núcleo é de suma importância para o controle do reator, ilustrando, assim, a utilidade do modelo desenvolvido de cinética inversa.

7.2.1 Variação linear entre níveis de potência

Neste transiente, consideraremos uma variação linear do nível de potência (ou fator de amplitude) entre $P_0 = 1$ e P_1 , que ocorre durante um determinado intervalo Δt_0 . Após atingir o nível P_1 , a potência será mantida neste patamar por um intervalo de tempo Δt_1 . No instante $\Delta t_0 + \Delta t_1$, uma nova variação de potência acontecerá, levando o nível de potência do reator de P_1 para P_2 , ao longo de um intervalo Δt_2 , e que será mantido até o instante final t_f . A expressão para a potência é dada por

$$P(t) = \begin{cases} (P_1 - 1)\frac{t}{\Delta t_0} + 1, & \text{se } 0 \leq t < \Delta t_0, \\ P_1, & \text{se } \Delta t_0 \leq t < \Delta t_0 + \Delta t_1, \\ (P_2 - P_1)\frac{t - \Delta t_0 - \Delta t_1}{\Delta t_2} + P_1, & \text{se } \Delta t_0 + \Delta t_1 \leq t < \Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2, \\ P_2, & \text{se } \Delta t_0 + \Delta t_1 + \Delta t_2 \leq t \leq t_f. \end{cases} \quad (7.6)$$

Nas figuras 7.3, 7.4 e 7.5 são apresentados os gráficos da reatividade, para diferentes velocidades de escoamento, em função de diversos perfis de potência. A variação temporal da reatividade obtida pela cinética inversa é importante para a operação do reator pois torna possível controlar a forma com a qual a potência irá variar durante o transiente, evitando picos de potência ou até mesmo podendo ser utilizado para a otimização de outras variáveis, como a concentração de venenos queimáveis.

Apesar de não ser possível de ser visto nestes gráficos, existe uma pequena descontinuidade na reatividade nos instantes nos quais a potência alterna entre uma função linear e uma constante. Isso ocorre pois a derivada da potência não é contínua, e essa característica reflete-se na reatividade devido à presença do termo $dP(t)/dt$ em sua expressão, causando, assim, esta pequena descontinuidade e também a mudança brusca na variação da reatividade em cada trecho do transiente.

De forma similar ao teste feito na subseção 7.1.2, usando a reatividade calculada na cinética inversa como entrada nas equações da cinética pontual obtemos um perfil de potência que se desvia da função de entrada, equação (7.6), em menos de 0.01%, garantindo, assim, a precisão destes resultados.

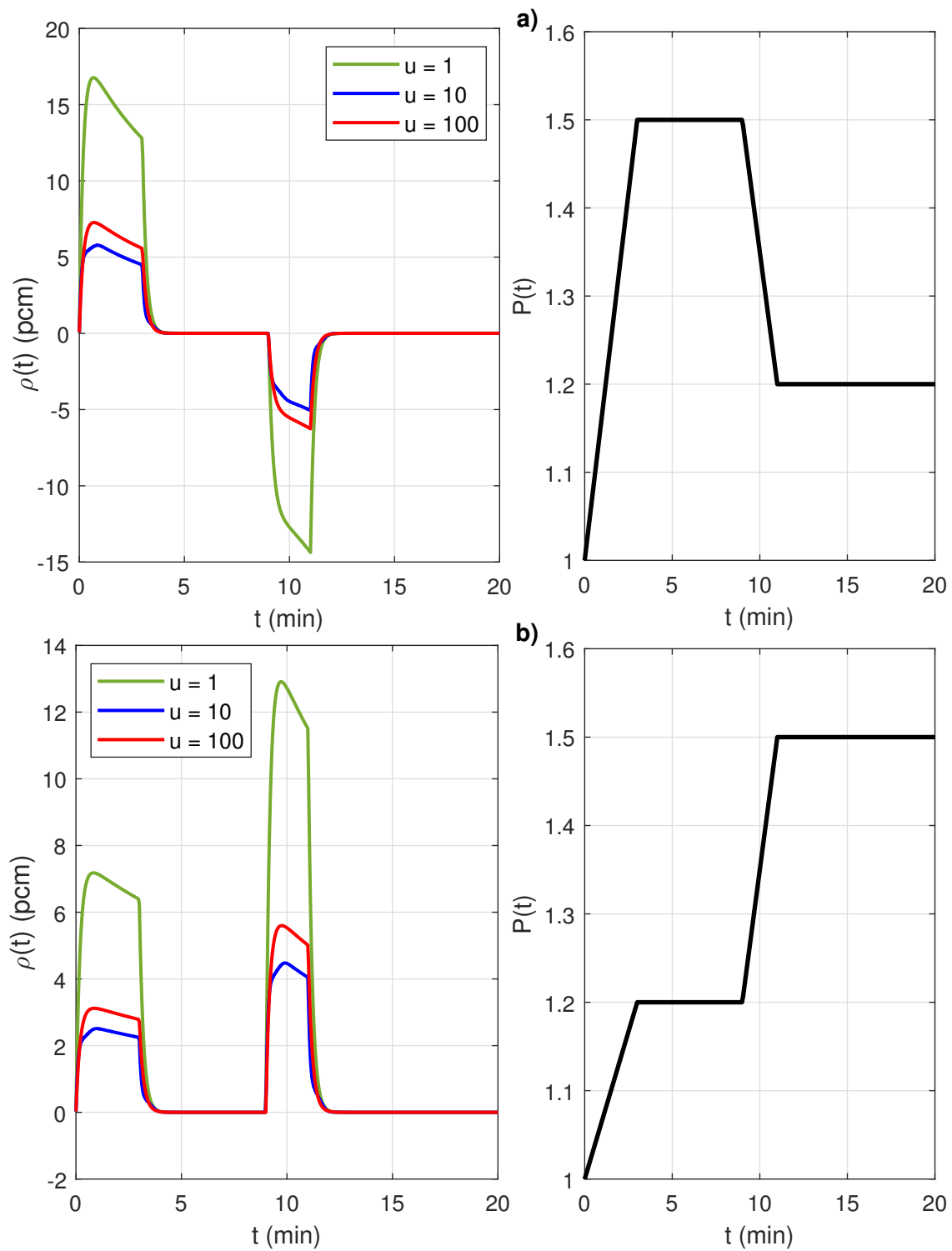


Figura 7.3: Variação temporal da reatividade e da potência relativa, com: a) $P_1 = 1.5, P_2 = 1.2$; b) $P_1 = 1.2, P_2 = 1.5$. Ambos com $\Delta t_0 = 3$ min, $\Delta t_1 = 6$ min, $\Delta t_2 = 2$ min e $t_f = 20$ min. Velocidades (u) em cm/s.

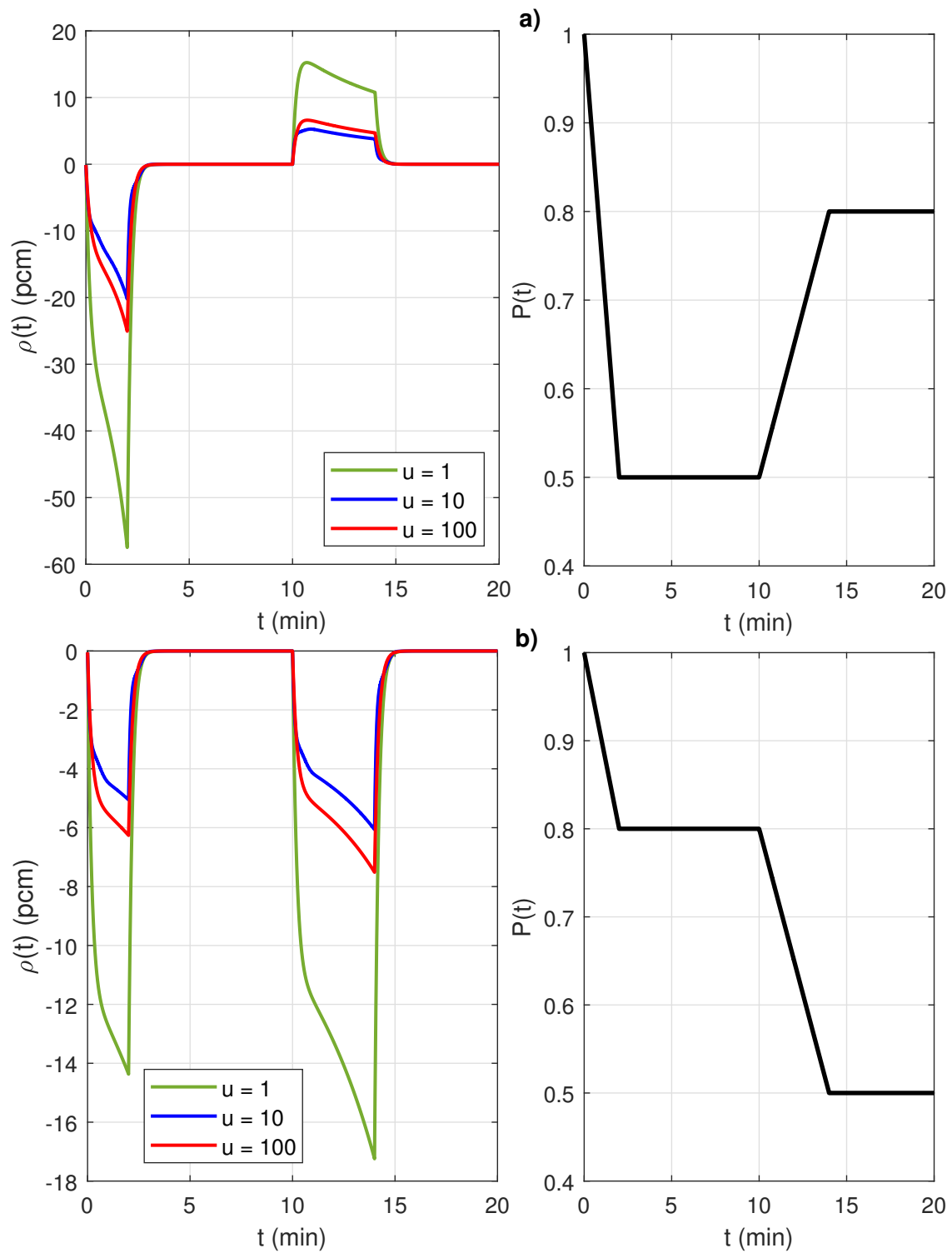


Figura 7.4: Variação temporal da reatividade e da potência relativa, com: a) $P_1 = 0.5, P_2 = 0.8$; b) $P_1 = 0.8, P_2 = 0.5$. Ambos com $\Delta t_0 = 2$ min, $\Delta t_1 = 8$ min, $\Delta t_2 = 4$ min e $t_f = 20$ min. Velocidades (u) em cm/s.

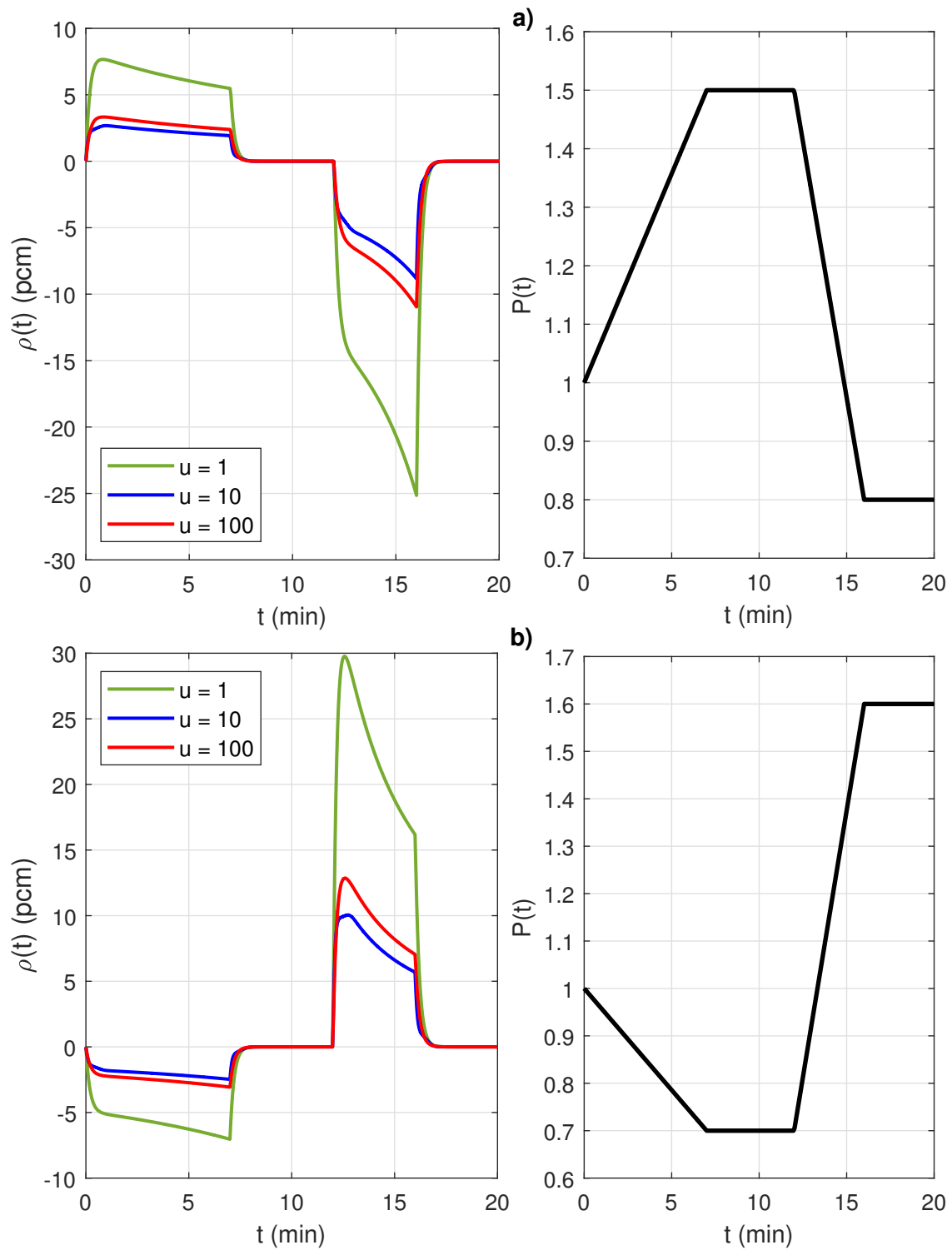


Figura 7.5: Variação temporal da reatividade e da potência relativa, com: a) $P_1 = 1.5, P_2 = 0.8$; b) $P_1 = 0.7, P_2 = 1.6$. Ambos com $\Delta t_0 = 7$ min, $\Delta t_1 = 5$ min, $\Delta t_2 = 4$ min e $t_f = 20$ min. Velocidades (u) em cm/s.

Vale ressaltar que, durante a operação normal do reator, o período de tempo no qual a potência varia e no qual se mantém constante é da ordem de horas [52]. No entanto, nos resultados apresentados nesta seção, foram considerados intervalos de tempo da ordem de minutos apenas para ilustrar como a reatividade varia durante operações desse tipo, além de reduzir o tempo computacional gasto. Se considerássemos intervalos da ordem de horas, duas principais diferenças ocorreriam: uma variação mais lenta da reatividade durante os períodos de variação da potência, e uma variação quase instantânea (relativamente ao período de tempo considerado) da reatividade para 0 nos períodos nos quais a potência permanece constante.

7.2.2 Regiões de criticalidade durante queda da velocidade de escoamento

Neste transiente, as equações da cinética inversa serão usadas para determinar a curva de criticalidade do reator durante uma diminuição da velocidade de escoamento, que também pode ser visto como um cenário de parada de bomba de circulação. As áreas acima e abaixo desta curva definem as regiões de criticalidade: a área acima da curva é a região de supercriticalidade, onde o reator encontra-se supercrítico, e abaixo define-se a região de subcriticalidade, que representa a condição de reator subcrítico.

Para encontrar a curva de criticalidade, resolvemos as ECI considerando $P(t) = 1$, ou seja, que a potência do reator mantenha-se constante durante todo o transiente no qual ocorre a diminuição exponencial da velocidade de escoamento, dada pela seguinte expressão:

$$u(t) = (u_0 - u_f)e^{-\kappa t} + u_f. \quad (7.7)$$

Como vimos na figura 3.3, quando a velocidade de escoamento do combustível diminui, o reator tende à supercriticalidade, pois mais precursores decairão dentro da região do núcleo, aumentando, assim, a quantidade de nêutrons atrasados. No entanto, pela forma como as equações da cinética pontual, e conseqüentemente as da cinética inversa, foram desenvolvidas, esse efeito não causa alterações na reatividade $\rho(t)$, e sim no parâmetro relacionado à perturbação da velocidade, $\mu(t)$. Como o parâmetro $\rho(t)$ representa uma inserção de reatividade externa (além de efeitos de

realimentação termohidráulica), podemos então encontrar a variação de reatividade necessária para contrabalancear o efeito da diminuição da velocidade de escoamento e manter o reator crítico.

Após encontrarmos a curva de reatividade que contrabalanceia a queda de velocidade do combustível, podemos concluir, que se a reatividade inserida estiver acima dela, não será o suficiente para compensar a variação da velocidade, definindo assim uma área denominada de região de supercriticalidade. Da mesma forma, se a reatividade inserida estiver abaixo da curva de criticalidade, ela será suficiente para tornar o reator subcrítico, definindo, então, a região de subcriticalidade.

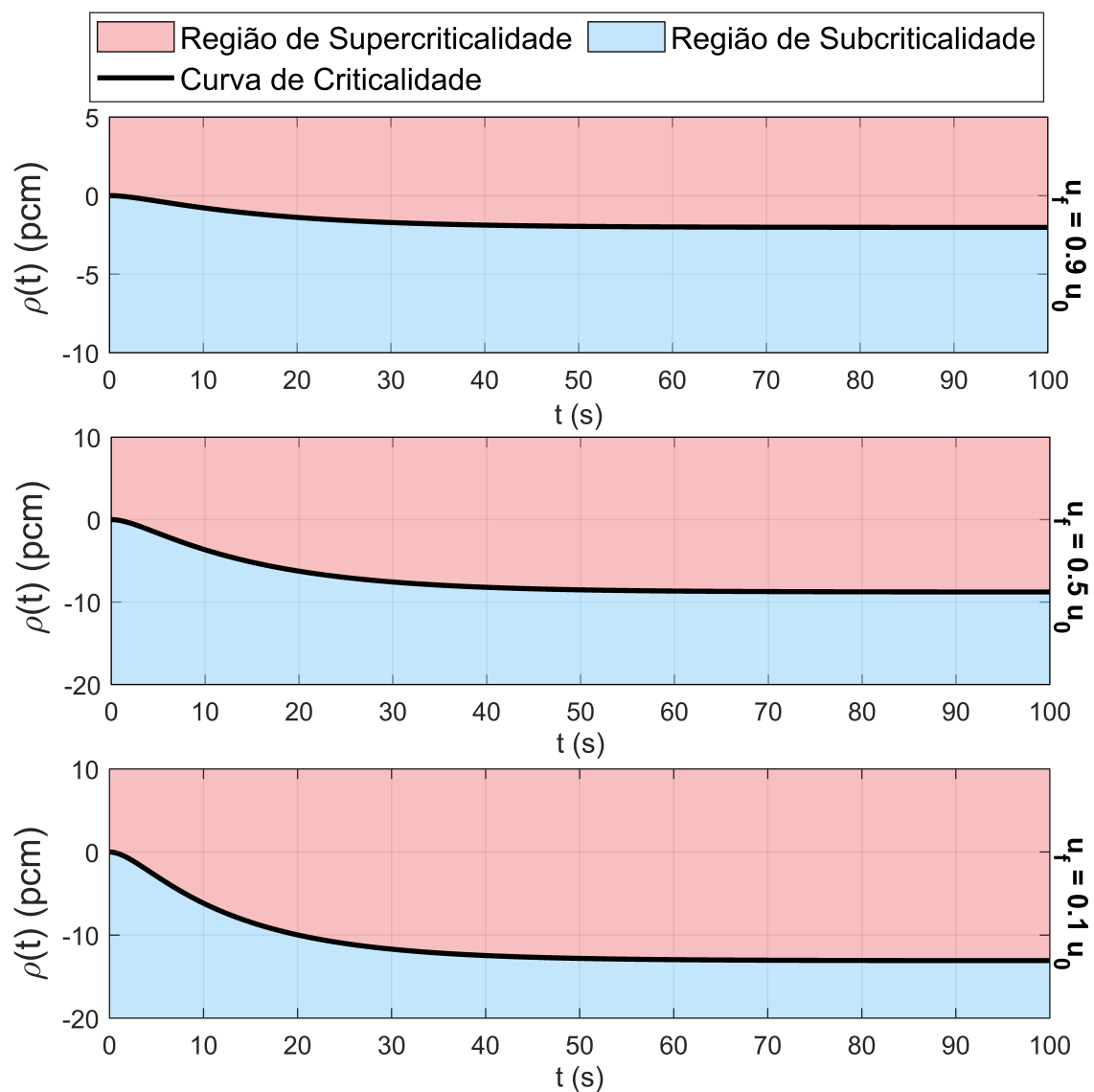


Figura 7.6: Curva de criticalidade e regiões de sub e supercriticalidade durante a queda da velocidade de escoamento, com velocidade inicial de $u_0 = 1 \text{ cm/s}$ e diferentes velocidades finais, $\kappa = 0.5 \text{ s}^{-1}$, e $t_f = 100 \text{ s}$.

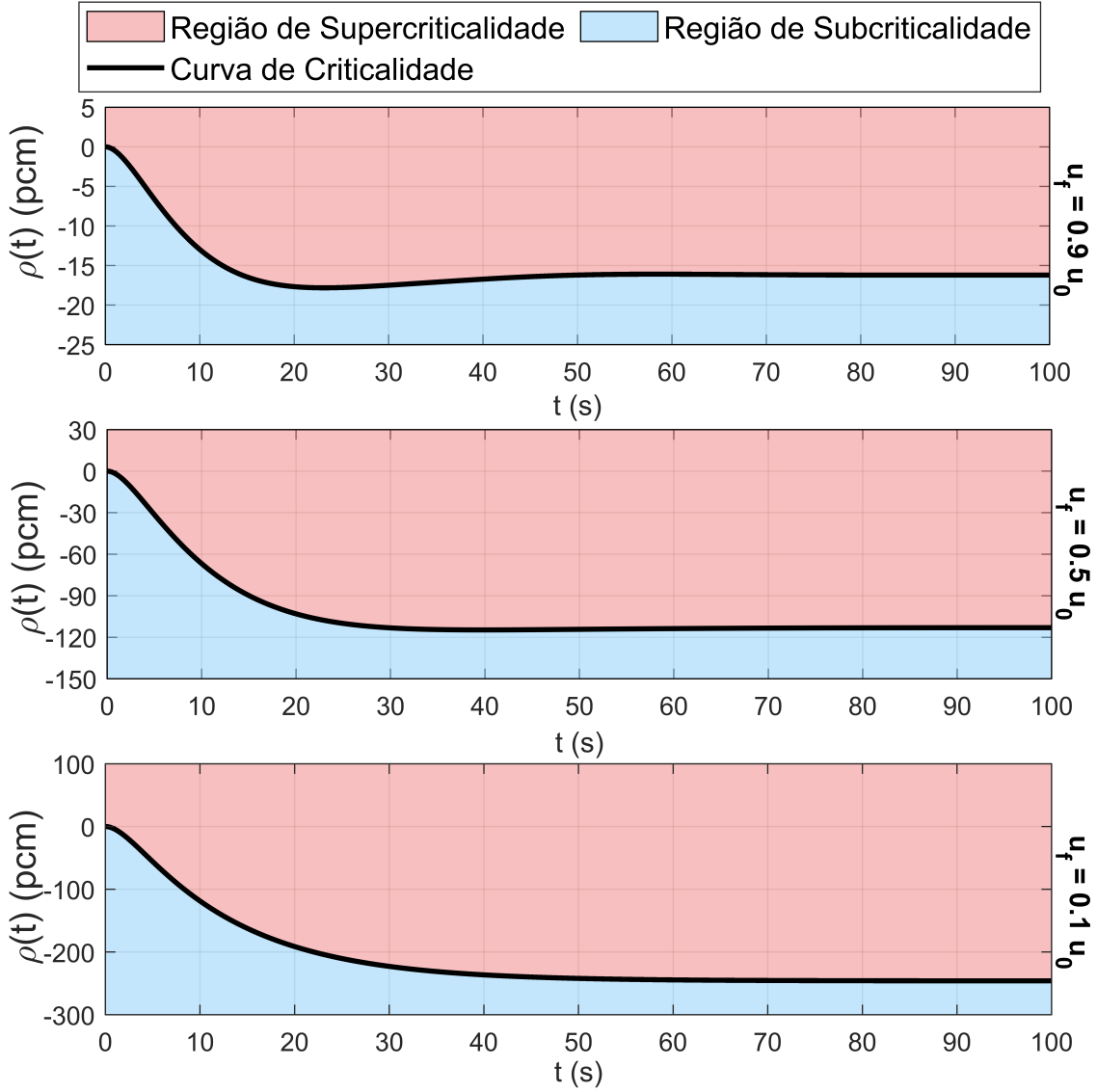


Figura 7.7: Curva de criticalidade e regiões de sub e supercriticalidade durante a queda da velocidade de escoamento, com velocidade inicial de $u_0 = 10 \text{ cm/s}$ e diferentes velocidades finais, $\kappa = 0.5 \text{ s}^{-1}$, e $t_f = 100 \text{ s}$.

As figuras 7.6, 7.7 e 7.8 apresentam os gráficos das curvas e regiões de criticalidade. Podemos notar que quanto maior for a queda da velocidade, maior será a reatividade externa necessária para tornar o reator subcrítico (região azul dos gráficos). Em todos os casos, a curva de criticalidade tende a um valor assintótico e que pode ser visto como a reatividade mínima necessária para evitar a supercriticalidade do reator. Podemos encontrar este valor ao considerarmos as equações (5.1) e (5.2) no seu estado estacionário, quando $t \rightarrow \infty$. A equação (5.1) ficará, então:

$$\rho_f = \hat{\beta}_f - \sum_{i=1}^I \hat{\lambda}_{i,f} G_{i,f}, \quad (7.8)$$

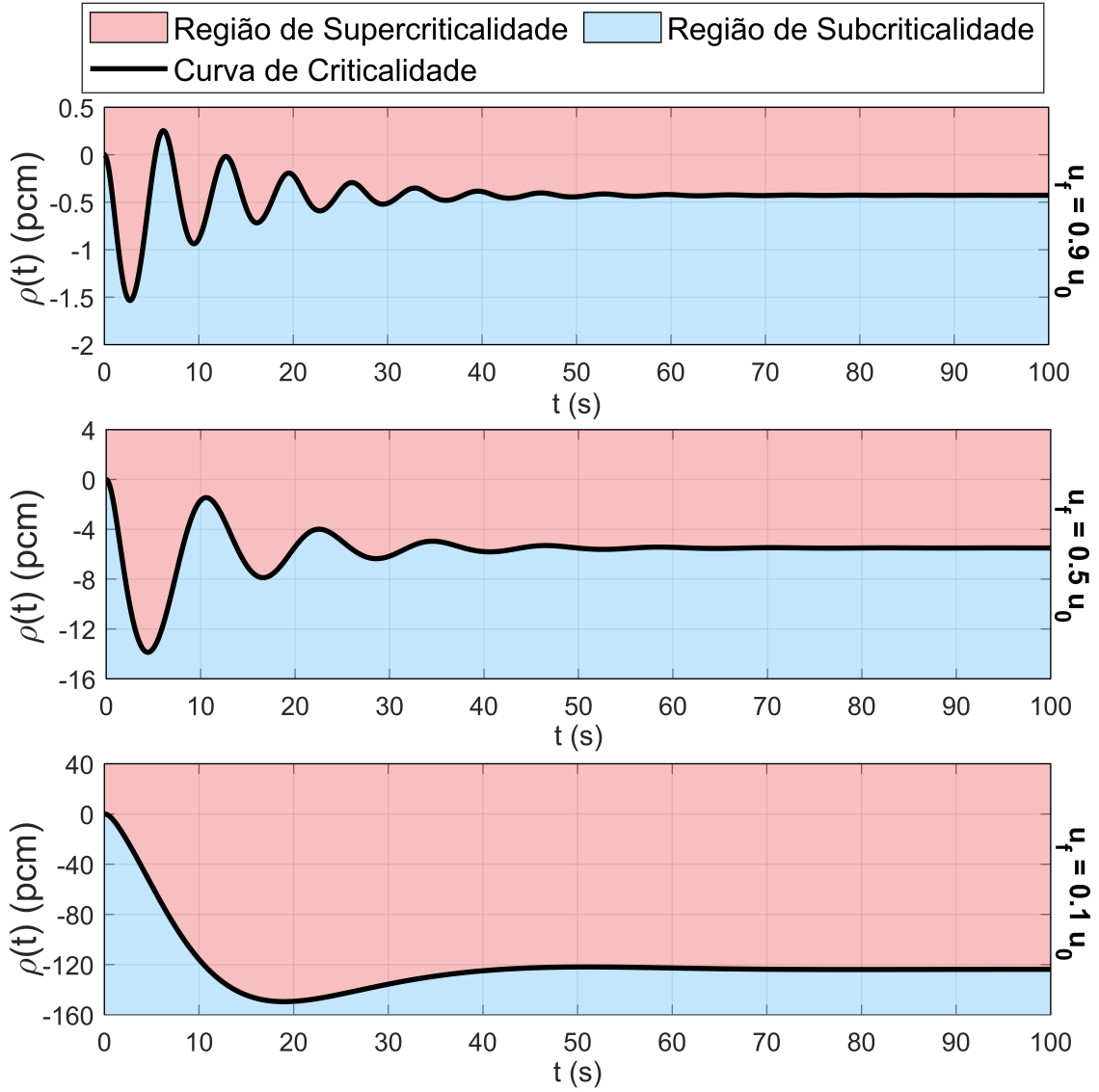


Figura 7.8: Curva de criticalidade e regiões de sub e supercriticalidade durante a queda da velocidade de escoamento, com velocidade inicial de $u_0 = 100 \text{ cm/s}$ e diferentes velocidades finais, $\kappa = 0.5 \text{ s}^{-1}$, e $t_f = 100 \text{ s}$.

onde o subíndice f indica o valor assintótico do respectivo parâmetro quando $t \rightarrow \infty$. O fator de amplitude dos precursores $G_{i,f}$ será dado avaliando a equação (5.2) nas mesmas condições:

$$0 = \hat{\beta}_{i,f} - \left[\hat{\lambda}_{i,f} + \mu_{i,f} + \eta_{i,f} - \sigma_{i,f} \right] G_i(t), \quad (7.9)$$

onde foram feitas as seguintes simplificações: $dG_i/dt \approx 0$ e $G_i(t - \tau(t)) \approx G_i(t)$. Além disso, vale lembrar que $P(t) = 1$ e, conseqüentemente, $dP/dt = 0$. Substi-

tuindo a equação (7.9) na (7.8), teremos:

$$\rho_f = \hat{\beta}_f - \sum_{i=1}^I \frac{\hat{\lambda}_{i,f} \hat{\beta}_{i,f}}{\hat{\lambda}_{i,f} + \mu_{i,f} + \eta_{i,f} - \sigma_{i,f}}, \quad (7.10)$$

que pode ser simplificada para

$$\rho_f = \sum_{i=1}^I \hat{\beta}_{f,i} \frac{\mu_{i,f} + \eta_{i,f} - \sigma_{i,f}}{\hat{\lambda}_{i,f} + \mu_{i,f} + \eta_{i,f} - \sigma_{i,f}}. \quad (7.11)$$

O cálculo da curva e das regiões de criticalidade é útil em casos de acidentes onde aconteça uma parada da bomba de circulação. Como o MSR tende à supercriticalidade quando há diminuição da velocidade de escoamento do combustível, é importante saber a reatividade externa necessária para desligar o reator quando acontecem esses tipos de acidentes.

As oscilações vistas na figura 7.8 acontecem quando o tempo de trânsito τ torna-se próximo ou menor que o tempo médio de vida dos precursores, λ^{-1} , que neste caso é de aproximadamente 12 segundos. Quando a velocidade final é maior que 25 cm/s ($L/12$), as oscilações tornam-se mais evidentes, como nos casos de velocidade final $u_f = 0.9u_0 = 90$ cm/s e $u_f = 0.5u_0 = 50$ cm/s. No caso de $u_f = 0.1u_0 = 10$ cm/s, e quando $u_0 \leq 10$ cm/s, como a velocidade assintótica é menor que 25 cm/s, a reatividade apresenta pouca oscilação. Essas oscilações estão relacionadas com a reentrada dos precursores e com a quantidade de voltas no reator e na tubulação eles fazem antes de decaírem completamente: quanto menor o tempo de trânsito τ , relativamente ao tempo médio de vida λ^{-1} , mais voltas os precursores completarão no sistema e maior a frequência dessas oscilações.

As diferentes amplitudes das variações das reatividades, para diferentes velocidades, podem ser explicadas pela figura 3.3. A variação da velocidade de escoamento causa uma variação na reatividade do sistema, que é mais acentuada no intervalo de 1 a 100 cm/s (para o conjunto de parâmetros usados). As reatividades vistas na figura 7.8 possuem ordens de grandeza similares às obtidas pela variação na velocidade vista na figura 7.9, mas com sinais opostos, visto que a reatividade do parâmetro $\rho(t)$, que incorpora as perturbações nos parâmetros nucleares, deve contrabalancear a variação causada pela perturbação na velocidade. Assim, quando

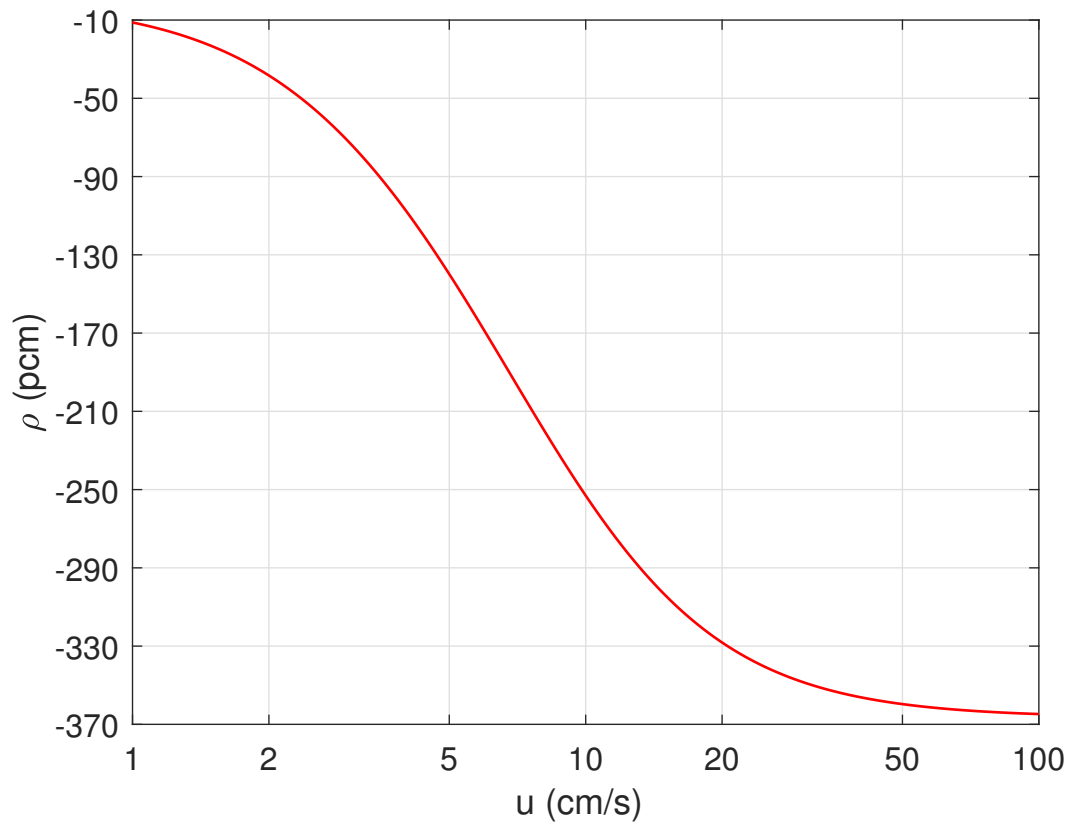


Figura 7.9: Variação da reatividade do sistema causada pela variação da velocidade de escoamento, em escala logarítmica para a velocidade.

a velocidade diminui partindo de 1 cm/s ou aumenta partindo de 50 cm/s, a reatividade necessária para manter constante o fator de amplitude do fluxo é da ordem de unidades de pcm, enquanto que perturbações em torno de uma velocidade de 10 cm/s, que está próxima de onde a derivada da curva da figura 7.9 é maior, necessitam de reatividades da ordem de dezenas ou até centenas de pcm.

Capítulo 8

Conclusões

O modelo de cinética inversa de nêutrons possui papel importante no cálculo em tempo real da reatividade de um reator nuclear. No caso de reatores a combustível líquido, o escoamento do combustível no núcleo e na tubulação externa modifica as equações dos precursores, o que influencia no cálculo da reatividade do sistema. Assim, um modelo de cinética inversa foi desenvolvido de modo a levar em consideração os fenômenos resultantes do escoamento do combustível, como a presença de novos parâmetros cinéticos e do tempo de trânsito na tubulação externa ao reator.

O modelo desenvolvido de cinética inversa foi derivado de um modelo de cinética pontual, o qual foi obtido seguindo uma metodologia similar à usada para combustíveis sólidos [37]. Soluções semi-analíticas e numéricas foram propostas para resolver as equações da cinética inversa (ECI), além de uma solução analítica para uma possível aproximação destas equações. Também foram mostradas as soluções numéricas para as outras equações apresentadas neste trabalho: das variáveis adjuntas, do sistema estacionário, da cinética espacial, e da cinética pontual.

Para testar o modelo proposto, foram simulados alguns casos de transientes. Nestes testes, foram comparados os resultados e as entradas das equações da cinética inversa e da cinética pontual. Como esses modelos são inversos entre si, o resultado de um mostrou concordância com a entrada do outro, garantindo, assim, a consistência do modelo de cinética inversa desenvolvido.

Após esses testes, o modelo de cinética inversa foi aplicado a dois transientes do MSR: variação da potência para diferentes níveis, e queda da velocidade de

escoamento do combustível. Com isso, pudemos ver a utilidade deste modelo para determinar a reatividade necessária tanto para executar a mudança do nível de potência desejada, quanto para manter o reator subcrítico durante uma parada de bomba de circulação.

Um caminho interessante para dar prosseguimento a este trabalho é no estudo da realimentação termohidráulica. Apesar de influenciar pouco na estrutura das ECI e nas suas soluções, como foi mostrado no capítulo 5, os efeitos de realimentação são importantes para uma representação mais fiel do MSR e serão necessários para descrever de forma mais próxima da realidade os transientes do reator, além de ser possível que ocorram novos fenômenos que necessitem de um estudo mais aprofundado para serem explicados.

Referências Bibliográficas

- [1] OECD NUCLEAR ENERGY AGENCY. “Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems”. Generation IV International Forum, 2014. Disponível em: <https://www.gen-4.org/gif/jcms/c_60729/technology-roadmap-update-2013>.
- [2] PIORO, I. *Handbook of Generation IV Nuclear Reactors*. Woodhead Publishing, 2016. doi:10.1016/C2014-0-01699-1.
- [3] SERP, J., ALLIBERT, M., BENEŠ, O., et al. “The Molten Salt Reactor (MSR) in Generation IV: Overview and Perspectives”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 77, pp. 308–319, 2014. doi:10.1016/j.pnucene.2014.02.014.
- [4] FORSBERG, C. W., PETERSON, P. F., PICKARD, P. S. “Molten-Salt-Cooled Advanced High-Temperature Teactor for Production of Hydrogen and Electricity”, *Nuclear Technology*, v. 144, n. 3, pp. 289–302, 2003. doi:10.13182/NT03-1.
- [5] HEJZLAR, P., TODREAS, N. E., SHWAGERAUS, E., et al. “Cross-Comparison of Fast Reactor Concepts with Various Coolants”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 239, n. 12, pp. 2672–2691, 2009. doi:10.1016/j.nucengdes.2009.07.007.
- [6] LEBLANC, D. “Molten Salt Reactor: A New Beginning for an Old Idea”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 240, n. 6, pp. 1644–1656, 2010. doi:10.1016/j.nucengdes.2009.12.033.
- [7] LOCATELLI, G., MANCINI, M., TODESCHINI, N. “Generation IV Nuclear Reactors: Current Status and Future Prospects”, *Energy Policy*, v. 61, pp. 1503–1520, 2013. doi:10.1016/j.enpol.2013.06.101.
- [8] DOLAN, T. J. *Molten Salt Reactors and Thorium Energy*. Woodhead Publishing, Elsevier, 2017. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/book/9780081011263/molten-salt-reactors-and-thorium-energy>>.

- [9] ROSENTHAL, M. W. “An Account of Oak Ridge National Laboratory’s Thirteen Research Reactors”, *Oak Ridge National Laboratory*, 2009. doi:10.2172/970897.
- [10] PÁZSIT, I., JONSSON, A., PÁL, L. “Analytical Solutions of the Molten Salt Reactor Equations”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 50, pp. 206–214, 2012. doi:10.1016/j.anucene.2012.05.037.
- [11] PÁZSIT, I., JONSSON, A. “Reactor Kinetics, Dynamic Response, and Neutron Noise in Molten Salt Reactors”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 167, pp. 61–76, 2011. doi:10.13182/NSE10-15.
- [12] DYKIN, V., PÁZSIT, I., SANCHEZ, R. “Remark on the Neutron Noise Induced by Propagating Perturbations in an MSR”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 90, pp. 93–105, 2016. doi:10.1016/j.anucene.2015.11.033.
- [13] PÁZSIT, I., DYKIN, V., SANCHEZ, R. “The Point Kinetic Component of Neutron Noise in an MSR”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 64, pp. 344–352, 2014. doi:10.1016/j.anucene.2013.08.004.
- [14] DINIZ, R. C. “Análise das Equações da Cinética Pontual para Reatores com Combustível Líquido Circulante”. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, Março de 2018. Disponível em: <http://www.con.ufrj.br/wp-content/uploads/2018/04/Disserta%C3%A7%C3%A3o-Rodrigo-Diniz.pdf>.
- [15] LECARPENTIER, D., CARPENTIER, V. “A Neutronics Program for Critical and Nonequilibrium Study of Mobile Fuel Reactors: The Cinsf1D Code”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 143, n. 1, pp. 33–46, 2003. doi:10.13182/NSE03-A2316.
- [16] KŘEPEL, J., GRUNDMANN, U., ROHDE, U., et al. “DYN1D-MSR Dynamics Code for Molten Salt Reactors”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 32, pp. 1799–1824, 2005. doi:10.1016/j.anucene.2005.07.007.
- [17] CAMMI, A., MARCELLO, V. D., LUZZI, L., et al. “A Multi-Physics Modelling Approach to the Dynamics of Molten Salt Reactors”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 38, pp. 1356–1372, 2011. doi:10.1016/j.anucene.2011.01.037.
- [18] WANG, S., RINEISKI, A., MASCHEK, W. “Molten Salt Related Extensions of the SIMMER-III Code and its Application for a Burner Reactor”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 236, n. 14–16, pp. 1580–1588, 2006. doi:10.1016/j.nucengdes.2006.04.022.

- [19] YAMAMOTO, T., MITACHI, K., IKEUCHI, K., et al. “Transient Characteristics of Small Molten Salt Reactor During Blockage Accident”, *Heat Transfer Asian Research*, v. 35, n. 6, pp. 434–450, 2006. doi:10.1002/htj.20123.
- [20] NICOLINO, C., LAPENTA, G., DULLA, S., et al. “Coupled Dynamics in the Physics of Molten Salt Reactors”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 35, n. 2, pp. 314–322, 2008. doi:10.1016/j.anucene.2007.06.015.
- [21] ZHANG, D. L., QIU, S. Z., SU, G. H., et al. “Analysis on the Neutron Kinetics for a Molten Salt Reactor”, *Progress in Nuclear Energy*, v. 51, n. 4–5, pp. 624–636, 2009. doi:10.1016/j.pnucene.2008.11.008.
- [22] KŘEPEL, J., GRUNDMANN, U., ROHDE, U., et al. “DYN3D-MSR Spatial Dynamics Code for Molten Salt Reactors”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 34, pp. 449–462, 2007. doi:10.1016/j.anucene.2006.12.011.
- [23] KÓPHÁZI, J., LATHOUWERS, D., KLOOSTERMAN, J. L. “Development of a Three-Dimensional Time-Dependent Calculation Scheme for Molten Salt Reactors and Validation of the Measurement Data of the Molten Salt Reactor Experiment”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 163, n. 2, pp. 118–131, 2009. doi:10.13182/NSE163-118.
- [24] ZHANG, D., QIU, S., SU, G. “Development of a Safety Analysis Code for Molten Salt Reactors”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 239, pp. 2778–2785, 2009. doi:10.1016/j.nucengdes.2009.08.020.
- [25] KERLIN, T. W., BALL, S. J., STEFFY, R. C. “Theoretical Dynamics Analysis of the Molten-Salt Reactor Experiment”, *Nuclear Technology*, v. 10, n. 2, pp. 118–132, 1971. doi:10.13182/NT71-A30920.
- [26] SUZUKI, N., SHIMAZU, Y. “Reactivity-Initiated-Accident Analysis without Scram of a Molten Salt Reactor”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 45, n. 6, pp. 575–581, 2008. doi:10.1080/18811248.2008.9711881.
- [27] LAPENTA, G., MATTIODA, F., RAVETTO, P. “Point Kinetic Model for Fluid Fuel Systems”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 28, pp. 1759–1772, 2001. doi:10.1016/S0306-4549(01)00012-3.
- [28] DULLA, S., RAVETTO, P., ROSTAGNO, M. M. “Neutron kinetics of Fluid-Fuel Systems by the Quasi-Static Method”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 31, n. 15, pp. 1709–1733, 2004. doi:10.1016/j.anucene.2004.05.004.
- [29] CHURCHICH, M. K., MOTT, J. E., ROBINSON, J. C., et al. “Real Time Analyzer for Inverse Kinetics Rod Drop Experiments”, *IEEE*

Transactions on Nuclear Science, v. 21, n. 1, pp. 771–775, 1974.
doi:10.1109/TNS.1974.4327548.

- [30] WAN, B., ZHOU, Q., CHEN, L., et al. “Reactivity Measurement at VENUS-II During Control Rods Drop Based on Inverse Kinetics Method”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 338, pp. 284–289, 2018. doi:10.1016/j.nucengdes.2018.08.019.
- [31] TAMURA, S., IZUTSU, S., ICHIKAWA, H. “Control Rod Calibration by Means of Inverse Kinetics Method”. In: *Proceedings of the 3rd Asian Symposium on Research Reactor*, pp. 432–439, Hitachi, Ibaraki (Japan), 11-14 Nov 1991. Disponível em: <https://inis.iaea.org/search/search.aspx?orig_q=RN:24011819>.
- [32] CHAO, Y. A., CHAPMAN, D. M., HILL, D. J., et al. “Dynamic Rod Worth Measurement”, *Nuclear Technology*, v. 132, pp. 403–412, 2000. doi:10.13182/NT00-A3153.
- [33] TAMURA, S. “Signal Fluctuation and Neutron Source in Inverse Kinetics Method for Reactivity Measurement in the Sub-critical Domain”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 40, pp. 153–157, 2003. doi:10.1080/18811248.2003.9715345.
- [34] DA SILVA, A. C. “Monitoração da Subcriticalidade em Reatores Nucleares com Fontes Externas de Nêutrons”. Dissertação de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, Fevereiro de 2007. Disponível em: <http://antigo.nuclear.ufrj.br/MSc%20Dissertacoes/2007/Dissertacao_adilson.pdf>.
- [35] KITANO, A., ITAGAKI, M., NARITA, M. “Memorial-Index-Based Inverse Kinetics Method for Continuous Measurement of Reactivity and Source Strength”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 37, pp. 53–59, 2000. doi:10.1080/18811248.2000.9714866.
- [36] DINIZ, R. C., GONÇALVES, A. C., ROSA, F. S. S. “Neutron Point Kinetics Model with Precursors’ Shape Function Update for Molten Salt Reactor”, *Nuclear Engineering and Design*, v. 360, 2020. doi:10.1016/j.nucengdes.2019.110466.
- [37] HENRY, A. F. “Nuclear-Reactor Analysis”. cap. 7, Cambridge, The MIT Press, 1975. doi:10.1063/1.3037598. Capítulo 7.

- [38] DINIZ, R. C., ROSA, F. S. S., GONÇALVES, A. C. “Calculation of Delayed Neutron Precursors’ Transit Time in the External Loop During a Flow Velocity Transient in a Molten Salt Reactor”, *Annals of Nuclear Energy*, v. 165, 2021. doi:10.1016/j.anucene.2021.108640.
- [39] VAN NIJEN, D. “Investigation of Natural Circulation Capabilities of the Molten Salt Fast Reactor”. Bachelor’s Thesis, Delft University of Technology, Delft, Netherlands, July 12 2018. Disponível em: <http://samofar.eu/wp-content/uploads/2018/10/VanNijen_David_BSc-thesis_2018.pdf>.
- [40] FUCHS, D., TABACHNIKOV, S. *Mathematical Omnibus: Thirty Lectures on Classic Mathematics*. Rhode Island, American Mathematical Society, 2000. Disponível em: <<https://bookstore.ams.org/mbk-46/>>.
- [41] GANDINI, A. “A Generalized Perturbation Method for Bi-linear Functionals of the Real and Adjoint Fluxes”, *Journal of Nuclear Energy*, v. 21, pp. 755–765, 1967. doi:10.1016/0022-3107(67)90086-X.
- [42] GANDINI, A. “High Order Time-Dependent Generalized Perturbation Theory”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 67, pp. 91–106, 1978. doi:10.13182/NSE78-A27240.
- [43] GANDINI, A. “Generalized Perturbation Theory for Nonlinear Systems from the Importance Conservation Principle”, *Nuclear Science and Engineering*, v. 77, pp. 316–343, 1981. doi:10.13182/NSE81-A19841.
- [44] BELL, G. I., GLASSTONE, S. *Nuclear Reactor Theory*. New York, Van Nostrand Reinhold, 1970. Disponível em: <<https://www.osti.gov/biblio/4074688>>.
- [45] DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. New York, John Wiley & Sons Ltd., 1976. doi:10.1109/TNS.1977.4329141.
- [46] EVEREST, G., VAN DER POORTEN, A., SHPARLINSKI, I., et al. *Recurrence Sequences*. Rhode Island, American Mathematical Society, 2003. doi:10.1112/S0024609304223268.
- [47] EVEREST, G., VAN DER POORTEN, A. J. “Factorisation in the Ring of Exponential Polynomials”. In: *Proceedings of the American Mathematical Society*, v. 125, pp. 1293–1298, 05 1997. Disponível em: <<https://www.jstor.org/stable/2162068>>.

- [48] ASL, F. M., ULSOY, A. G. “Analysis of a System of Linear Delay Differential Equations”, *Journal of Dynamic Systems, Measurement, and Control*, v. 125, pp. 215–223, 2003. doi:10.1115/1.1568121.
- [49] MOIN, P. “Fundamentals of Engineering Numerical Analysis”. 2 ed., cap. 3, New York, Cambridge University Press, 2010. doi:10.1017/CBO9780511781438.
- [50] BURDEN, R. L., FAIRES, J. D. “Numerical Analysis”. 9 ed., cap. 4, Boston, Cengage Learning, 2010. doi:10.13140/2.1.4830.2406.
- [51] LINDFIELD, G., PENNY, J. “Numerical Methods Using MATLAB”. 3 ed., cap. 2, Academic Press, 2012. doi:10.1016/C2016-0-00395-9.
- [52] MARTINEZ, A. S., OLIVEIRA, E. D. A. “The Influence of Optimum Power Level Change on Boration and Dilution Operations”, *Nuclear Technology*, v. 103, n. 2, pp. 288–293, 1993. doi:10.13182/NT93-A34850.
- [53] VEBERIČ, D. “Lambert W Function for Applications in Physics”, *Computer Physics Communications*, v. 183, pp. 2622–2628, 2012. doi:10.1016/j.cpc.2012.07.008.
- [54] STEWART, S. “A New Elementary Function for Our Curricula?” *Australian Senior Mathematics Journal*, v. 19, pp. 8–26, 2005. Disponível em: <<https://eric.ed.gov/?id=EJ720055>>.
- [55] YI, S., NELSON, P. W., ULSOY, A. G. *Time-Delay Systems: Analysis and Control Using the Lambert W Function*. Singapore, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2010. doi:10.1142/7759.
- [56] YI, S., ULSOY, A. G., NELSON, P. W. “Solution of Systems of Linear Delay Differential Equations via Laplace Transformation”. In: *Proceedings of the IEEE Conference on Decision and Control*, pp. 2535–2540, 01 2007. doi:10.1109/CDC.2006.377712.

Apêndice A

Função W de Lambert

A função W de Lambert, simbolizada como $W(z)$, é definida pela solução do seguinte problema:

$$we^w = z, \quad (\text{A.1})$$

ou seja, $w = W_n(z)$. Para cada valor inteiro de n há um ramo da função W de Lambert, $W_n(z)$, que satisfaz a relação expressa na equação (A.1), onde tanto z e $W_n(z)$ são números complexos.

Quando considerados somente números reais, existem apenas 2 ramos: o ramo para $n = 0$, $W_0(z)$, também chamado de ramo principal, e o ramo para $n = -1$, $W_{-1}(z)$. Os gráficos dessas duas funções estão mostrados na figura A.1.

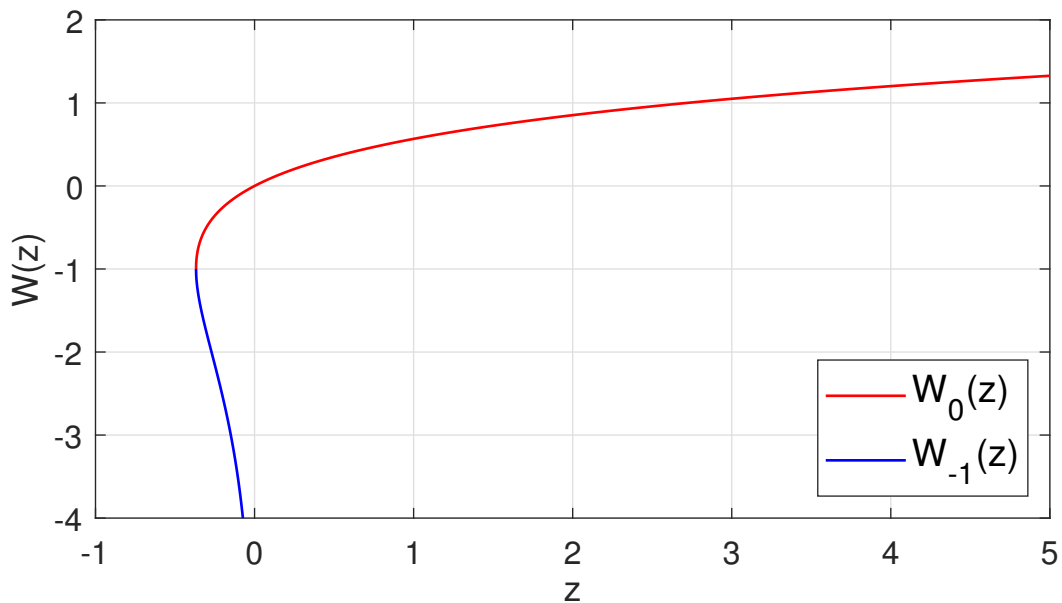


Figura A.1: Gráfico dos ramos reais da função W de Lambert.

Para $z \geq 0$, a solução para (A.1) é apenas o ramo principal $W_0(z)$, enquanto que para $z < 0$, há também a solução $W_{-1}(z)$. O limite inferior para o qual ambos os ramos estão definidos é $z = -1/e$, ponto na qual a função W se ramifica.

Ao analisar a equação que define $W(z)$, podemos prontamente identificar alguns valores especiais para o ramo principal:

$$W_0(0) = 0, \quad (\text{A.2a})$$

$$W_0(e) = 1, \quad (\text{A.2b})$$

$$W_0(-1/e) = -1. \quad (\text{A.2c})$$

Analisando a figura A.1, também podemos identificar alguns valores para o ramo $W_{-1}(z)$:

$$W_{-1}(-1/e) = -1, \quad (\text{A.3a})$$

$$\lim_{z \rightarrow 0} W_{-1}(z) = -\infty. \quad (\text{A.3b})$$

A partir da definição de $W(z)$, podemos identificar algumas características. Por exemplo, multiplicando ambos os lados por e^{-w} , temos

$$\begin{aligned} w &= ze^{-w}, \\ W(z) &= \frac{z}{\exp W(z)}, \\ W(z) &= \frac{z}{\exp \frac{z}{\exp \frac{z}{\exp \frac{z}{\dots}}}}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Essa relação recursiva pode ser usada para aproximar o ramo principal quando $W_0(z) < 1$, ou seja, quando $-e^{-1} < z < e$ [53]. Outra relação recursiva possível pode ser obtida ao aplicar o logaritmo natural em ambos os lados da equação (A.1):

$$\begin{aligned} w &= \ln z - \ln w, \\ W(z) &= \ln z - \ln W(z), \\ W(z) &= \ln z - \ln(\ln z - \ln(\ln z - \dots)), \\ W(z) &= \ln \frac{z}{\ln \frac{z}{\ln \frac{z}{\ln \frac{z}{\dots}}}}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

A.1 Equações do cálculo do tempo de trânsito

Relembrando a equação (2.46),

$$\tau + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t_1}}{\kappa} e^{\kappa \tau} = \tau_f + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t_1}}{\kappa}, \quad (\text{A.8})$$

podemos reescreve-la como

$$\kappa \tau + A e^{\kappa \tau} = A + B, \quad (\text{A.9})$$

onde

$$A = \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} e^{-\kappa t_1}, \quad (\text{A.10a})$$

$$B = \kappa \tau_f. \quad (\text{A.10b})$$

Fazendo a mudança de variável $x = A + B - \kappa \tau$, obtemos:

$$\begin{aligned} A e^{A+B} e^{-x} &= x, \\ A e^{A+B} &= x e^x, \\ x &= W_n(A e^{A+B}), \\ A + B - \kappa \tau &= W_n(A e^{A+B}), \\ \tau &= \frac{A + B}{\kappa} - \frac{1}{\kappa} W_n(A e^{A+B}), \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

tendo sido usada a definição $x e^x = y \rightarrow x = W_n(y)$. Substituindo A e B , temos então

$$\tau = \tau_f + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t_1}}{\kappa} - \frac{1}{\kappa} W_n \left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp \left[-\kappa (t_1 - \tau_f) \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} e^{-\kappa t_1} \right] \right). \quad (\text{A.12})$$

Como o argumento de W_n é real e $\tau_f - \tau_0$ é sempre positivo (pois a velocidade assintótica final é menor que a inicial), há apenas solução real no ramo principal da função W de Lambert, W_0 :

$$\tau = \tau_f + \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa t_1}}{\kappa} - \frac{1}{\kappa} W_0 \left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp \left[-\kappa (t_1 - \tau_f) \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} e^{-\kappa t_1} \right] \right). \quad (\text{A.13})$$

De forma semelhante, podemos resolver a equação (2.49):

$$T - \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{e^{-\kappa T}}{\kappa} = \tau_f - \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{1}{\kappa}. \quad (\text{A.14})$$

Reescrevendo a equação como

$$\kappa T - Ae^{-\kappa T} = B - A, \quad (\text{A.15})$$

onde

$$A = \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0}, \quad (\text{A.16a})$$

$$B = \kappa\tau_f. \quad (\text{A.16b})$$

Fazendo a mudança de variável $x = \kappa T + A - B$:

$$\begin{aligned} Ae^{A-B}e^{-x} &= x, \\ Ae^{A-B} &= xe^x, \\ x &= W_n(Ae^{A-B}), \\ \kappa T + A - B &= W_n(Ae^{A-B}), \\ T &= \frac{B - A}{\kappa} + \frac{1}{\kappa}W_n(Ae^{A-B}), \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

e substituindo A e B , obtemos:

$$T = \tau_f - \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{1}{\kappa} + \frac{1}{\kappa}W_n\left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp\left[\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} - \kappa\tau_f\right]\right). \quad (\text{A.18})$$

Da mesma forma como no caso anterior para τ , o argumento de W_n é sempre positivo, sendo então a solução escrita apenas em função do ramo principal da função W de Lambert. Assim:

$$T = \tau_f - \frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \frac{1}{\kappa} + \frac{1}{\kappa}W_0\left(\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} \exp\left[\frac{\tau_f - \tau_0}{\tau_0} - \kappa\tau_f\right]\right). \quad (\text{A.19})$$

A.2 Equação diferencial ordinária não-linear

Uma situação onde a função W de Lambert é útil para encontrar soluções analíticas é em equações diferenciais ordinárias não-lineares. Um exemplo dessas equações não-lineares é a que modela matematicamente a combustão [54]:

$$\frac{dy}{dt} = y^2(1 - y), \quad (\text{A.20})$$

com uma condição inicial $y(0) = y_0$. A condição física para $y(t)$ é que seja positiva e menor que 1. Separando as diferenciais dy e dt e integrando, temos

$$\int \frac{dy}{y^2 - y^3} = \int dt, \quad (\text{A.21})$$
$$\ln\left(\frac{y}{1 - y}\right) - \frac{1}{y} = t + C,$$

onde C é a constante de integração e pode ser determinada pela condição inicial:

$$\ln\left(\frac{y(0)}{1 - y(0)}\right) - \frac{1}{y(0)} = 0 + C, \quad (\text{A.22})$$
$$C = \ln\left(\frac{y_0}{1 - y_0}\right) - \frac{1}{y_0}.$$

A equação (A.21) pode ser reescrita como

$$\ln\left(\frac{1}{1/y - 1}\right) = t + C + \frac{1}{y}, \quad (\text{A.23})$$
$$\frac{1}{1/y - 1} = e^{t+C} \times e^{1/y},$$

e fazendo a substituição $x = 1/y - 1$, obtemos

$$\frac{1}{x} = e^{t+C} \times e^{x+1},$$
$$e^{-t-C-1} = xe^x, \quad (\text{A.24})$$
$$x = W_n\left(e^{-t-C-1}\right).$$

Substituindo de volta x e C , chegamos à solução final:

$$y(t) = \frac{1}{W_0\left(\frac{1-y_0}{y_0} \exp\left[-t + \frac{1-y_0}{y_0}\right]\right) + 1}. \quad (\text{A.25})$$

Como $y_0 < 1$, o argumento de W será sempre positivo, logo apenas o ramo principal é possível. A figura A.2 mostra o gráfico de $y(t)$.

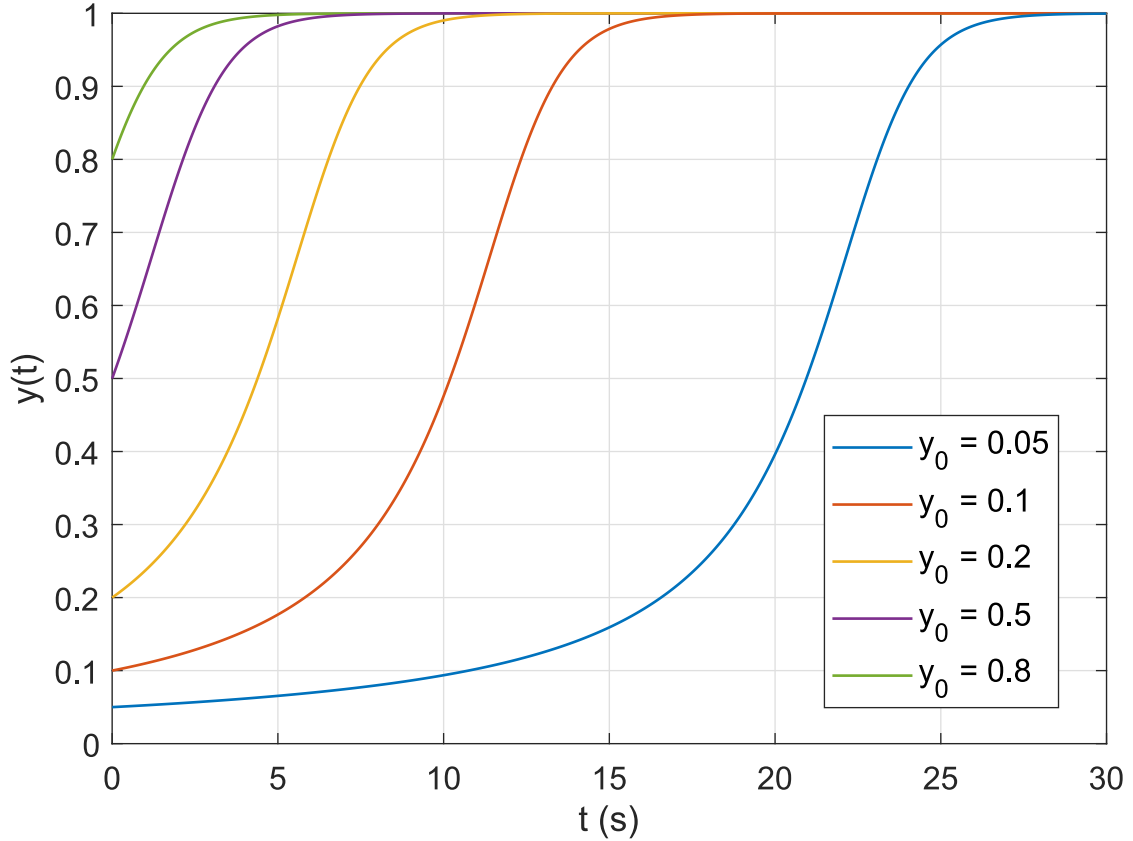


Figura A.2: Gráfico de $y(t)$ para diferentes valores da condição inicial y_0 .

A.3 Equação diferencial atrasada (EDA)

Outra aplicação da função W de Lambert é na solução das equações diferenciais atrasadas lineares. Para os casos homogêneos, essas equações possuem a seguinte forma [55]:

$$\frac{dy(t)}{dt} + Ay(t) - A_d y(t - \tau) = 0, \quad (\text{A.26})$$

enquanto que no caso não-homogêneo, a equação é dada por

$$\frac{dy(t)}{dt} + Ay(t) - A_d y(t - \tau) = g(t). \quad (\text{A.27})$$

Em ambos os casos, as condições iniciais são dadas por $y(0) = y_0$ e pela função $y(t)$ nos instantes entre $-\tau$ e 0 : $y(-\tau \leq t < 0) = f(t)$. A função $f(t)$ não necessita ter o mesmo valor de $y(t)$ em $t = 0$.

Um exemplo de equação diferencial atrasada homogênea é quando se usa a aproximação de *prompt-jump* [14] nas equações da cinética pontual, na qual se desconsidera o termo $\Lambda(t) dP/dt$. Assim, considerando apenas uma família de precursores, temos:

$$0 = (\rho - \hat{\beta})P(t) + \hat{\lambda}G(t) \rightarrow P(t) = \frac{\hat{\lambda}}{\hat{\beta} - \rho} G(t), \quad (\text{A.28})$$

e substituindo na equação dos precursores:

$$\frac{dG(t)}{dt} = \frac{1}{\Lambda_i} \left[\frac{\rho \hat{\lambda}}{\hat{\beta} - \rho} - \mu - \eta \right] G(t) + \frac{\sigma}{\Lambda_i} G(t - \tau). \quad (\text{A.29})$$

Para podermos resolver analiticamente esse problema, foi necessário desconsiderar a variação temporal dos parâmetros cinéticos e do tempo de trânsito τ . Podemos escrever essa equação de forma similar à (A.26):

$$\frac{dG(t)}{dt} + AG(t) - A_d G(t - \tau) = 0, \quad (\text{A.30})$$

onde

$$A \equiv \frac{1}{\Lambda_i} \left[-\frac{\rho \hat{\lambda}}{\hat{\beta} - \rho} + \mu + \eta \right], \quad (\text{A.31a})$$

$$A_d \equiv \frac{\sigma}{\Lambda_i}. \quad (\text{A.31b})$$

Podemos começar resolvendo essa equação com o mesmo método de uma equação diferencial ordinária. Considerando uma solução do tipo exponencial, e^{rt} , obtemos:

$$\begin{aligned} r e^{rt} + A e^{rt} - A_d e^{r(t-\tau)} &= 0, \\ r + A - A_d e^{-r\tau} &= 0, \\ (r + A)e^{r\tau} - A_d &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

que é a equação característica desse problema. Fazendo a substituição $x = (r + A)\tau$, temos:

$$\begin{aligned}
\frac{x}{\tau} e^x e^{-A\tau} &= A_d, \\
xe^x &= A_d \tau e^{A\tau}, \\
x_k &= W_k(A_d \tau e^{A\tau}),
\end{aligned} \tag{A.33}$$

e, finalmente,

$$r_k = \frac{1}{\tau} W_k(A_d \tau e^{A\tau}) - A, \tag{A.34}$$

onde o índice k percorre todos os números inteiros.

A solução de $G(t)$ será, então:

$$G(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k e^{r_k t}, \tag{A.35}$$

com os coeficientes C_k dados pela condição pré-transiente: $G(t) = 1$ para $t \in [-\tau, 0]$.

Neste caso, devemos considerar todos os infinitos ramos da função W de Lambert, pois não é necessário que as raízes da equação característica sejam reais. Quando substituídas na expressão de $G(t)$, como as condições iniciais são reais, os coeficientes C_k serão números complexos de tal forma que o somatório seja real. Isso é similar ao caso de equações características de equações diferenciais ordinárias que possuam raízes complexas.

O cálculo dos coeficientes C_k pode ser feito de duas maneiras (entre possivelmente outras). O primeiro método, proposto por Ulsoy *et al.* [48], consiste em truncar o somatório infinito entre $-N$ e N :

$$G(t) \approx \sum_{k=-N}^N C_k e^{r_k t}. \tag{A.36}$$

Em seguida, dividimos o intervalo $[-\tau, 0]$ em $2N + 1$ sub-intervalos e avaliamos a equação em cada um desses sub-intervalos:

$$G(t_i) = \sum_{k=-N}^N C_k e^{r_k t_i}, \tag{A.37}$$

onde

$$t_i = -\frac{i}{2N} \tau, \quad i = 0, \dots, 2N. \tag{A.38}$$

Isso nos dá um sistema de $2N + 1$ equações com $2N + 1$ incógnitas, os coeficientes C_k . Escrevendo esse sistema na forma matricial, teremos:

$$\mathbf{G} = \mathbf{MC}, \tag{A.39}$$

onde

$$\mathbf{M} \equiv \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \exp\left(-r_{-N}\frac{i}{2N}\tau\right) & \dots & \exp\left(-r_j\frac{i}{2N}\tau\right) & \dots & \exp\left(-r_N\frac{i}{2N}\tau\right) \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \exp(-r_{-N}\tau) & \dots & \exp(-r_j\tau) & \dots & \exp(-r_N\tau) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.40a})$$

$$\mathbf{G} \equiv [G(0), \dots, G(t_i), \dots, G(-\tau)]^\top = [1, \dots, 1, \dots, 1]^\top, \quad (\text{A.40b})$$

$$\mathbf{C} \equiv [C_{-N}, \dots, C_j, \dots, C_N]^\top, \quad (\text{A.40c})$$

e lembrando que $i = 0, 1, \dots, 2N - 1, 2N$ e $j = -N, -N + 1, \dots, N - 1, N$. Os coeficientes C_k serão dados, então, por

$$\mathbf{C} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{G}. \quad (\text{A.41})$$

O segundo método para calcular os coeficientes C_k , proposto por Sun Yi *et al.* [56], consiste em usar a transformada de Laplace. Aplicando essa transformada em cada termo da equação (A.30), temos que

$$\mathcal{L}\{G(t)\}(s) = \int_0^\infty e^{-st}G(t) dt = F(s), \quad (\text{A.42a})$$

$$\mathcal{L}\left\{\frac{dG(t)}{dt}\right\}(s) = \int_0^\infty e^{-st}\frac{dG(t)}{dt} dt = sF(s) - G(0), \quad (\text{A.42b})$$

$$\mathcal{L}\{G(t - \tau)\}(s) = \int_0^\infty e^{-st}G(t - \tau) dt = \int_0^\tau e^{-st}G(t - \tau) dt + \int_\tau^\infty e^{-st}G(t - \tau) dt. \quad (\text{A.42c})$$

Para resolvermos a transformada do termo atrasado, fazemos a substituição $t' = t - \tau$:

$$\int_0^\infty e^{-st}G(t - \tau) dt = e^{-s\tau} \int_{-\tau}^0 e^{-st'}G(t') dt' + e^{-s\tau} \int_0^\infty e^{-st'}G(t') dt', \quad (\text{A.43})$$

e como sabemos que $G(t) = 1$ para $t \in [-\tau, 0]$, podemos integrar o primeiro termo do lado direito da equação:

$$\int_0^\infty e^{-st}G(t - \tau) dt = H(s) + e^{-s\tau}F(s), \quad (\text{A.44})$$

onde

$$H(s) \equiv \frac{1 - e^{-s\tau}}{s}. \quad (\text{A.45})$$

Assim, fazendo a transformada de Laplace da equação (A.30), obtemos

$$sF(s) - 1 + AF(s) - A_d e^{-s\tau} F(s) - A_d H(s) = 0, \quad (\text{A.46})$$

que dá a seguinte solução para $F(s)$:

$$F(s) = \frac{1 + A_d H(s)}{s + A - A_d e^{-s\tau}}. \quad (\text{A.47})$$

Como já temos a solução de $G(t)$ a menos dos seus coeficientes, podemos determinar a expressão para sua transformada de Laplace $F(s)$ usando a expressão (A.35):

$$\begin{aligned} \int_0^\infty e^{-st} G(t) dt &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} C_k \int_0^\infty e^{-st} e^{r_k t} dt, \\ F(s) &= \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{C_k}{s - r_k}. \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

Igualando essa expressão de $F(s)$ com a dada pela equação (A.47), temos

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{C_k}{s - r_k} = \frac{1 + A_d H(s)}{s + A - A_d e^{-s\tau}}, \quad (\text{A.49})$$

e passando o denominador do lado direito para o numerador do lado esquerdo da equação, obtemos

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} C_n \frac{s + A - A_d e^{-s\tau}}{s - r_k} = 1 + A_d H(s). \quad (\text{A.50})$$

Ao tomarmos o limite $s \rightarrow r_m$, podemos ver que todos os denominadores serão não-nulos, exceto no termo do somatório onde $k = m$. No entanto, podemos identificar o numerador $s + A - A_d e^{-s\tau}$ como a equação característica do problema, ou seja, o numerador torna-se nulo quando s for igual a uma das suas raízes r_m . Assim, os termos do somatório nos quais $k \neq m$ se anulam, enquanto que para $k = m$ precisamos resolver o limite para $s \rightarrow r_m$. a equação (A.50), quando tomamos esse

limite, fica:

$$C_m \lim_{s \rightarrow r_m} \frac{s + A - A_d e^{-s\tau}}{s - r_m} = 1 + A_d H(r_m). \quad (\text{A.51})$$

Se substituirmos s por r_m , obtemos a indefinição $0/0$. Assim, usando a regra de L'Hôpital, temos

$$\begin{aligned} C_m \lim_{s \rightarrow r_m} \frac{\frac{\partial}{\partial s}(s + A - A_d e^{-s\tau})}{\frac{\partial}{\partial s}(s - r_m)} &= 1 + A_d H(r_m), \\ C_m \lim_{s \rightarrow r_m} \frac{1 + A_d \tau e^{-s\tau}}{1} &= 1 + A_d H(r_m), \\ C_m &= \frac{1 + A_d H(r_m)}{1 + A_d \tau e^{-r_m \tau}}. \end{aligned} \quad (\text{A.52})$$

Finalmente, a solução para $G(t)$ fica:

$$G(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{1 + \frac{A_d}{r_k} (1 - e^{-r_k \tau})}{1 + A_d \tau e^{-r_k \tau}} e^{r_k t}, \quad (\text{A.53})$$

A diferença entre os dois métodos apresentados é que, enquanto no segundo método os coeficientes C_k dependem apenas dos coeficientes e da condição inicial da equação diferencial atrasada, no primeiro método eles também dependem do valor N usado para truncar o somatório. No entanto, para N suficientemente grande, ambos métodos convergem para o mesmo resultado.

Sun Yi *et al.* [56] também apresenta um método para resolver um sistema de equações diferenciais atrasadas, e que poderia ser usado para resolver o sistema de equações da cinética pontual sem a necessidade da aproximação de *prompt-jump*. No entanto, como é preciso desconsiderar a variação temporal de todos os parâmetros cinéticos e do tempo de trânsito, acaba não sendo muito vantajoso usar a solução analítica obtida por esse método, sendo melhor resolver numericamente as equações sem essas aproximações. De qualquer forma, tanto o método para uma equação atrasada quanto para um sistema de equações são interessantes para vermos como a função W de Lambert surge nos problemas e que é útil para encontrarmos soluções analíticas em termos de funções elementares “generalizadas”.