UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática

Dissertação

Solução das equações da Cinética Pontual de Nêutrons com efeitos de temperatura e venenos: Um estudo de caso do acidente em Chernobyl

Natália Barros Schaun

Pelotas, 2021

Natália Barros Schaun

Solução das equações da Cinética Pontual de Nêutrons com efeitos de temperatura e venenos: Um estudo de caso do acidente em Chernobyl

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática

Orientador: Prof. Dr. Claudio Zen Petersen
Coorientadora: Prof. Dr^a. Fernanda Tumelero

Pelotas, 2021

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

S313s Schaun, Natália Barros

Solução das equações da cinética pontual de nêutrons com efeitos de temperatura e venenos : um estudo de caso do acidente em Chernobyl / Natália Barros Schaun ; Claudio Zen Petersen, orientador ; Fernanda Tumelero, coorientadora. — Pelotas, 2021.

107 f.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, 2021.

1. Equações da cinética pontual de nêutrons. 2. Efeitos de temperatura. 3. Efeitos dos venenos. 4. Método de Rosenbrock. I. Petersen, Claudio Zen, orient. II. Tumelero, Fernanda, coorient. III. Título.

CDD : 621.483

SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL DE NÊUTRONS COM EFEITOS DE TEMPERATURA E VENENOS: UM ESTUDO DE CASO DO ACIDENTE EM CHERNOBYL

por

Natália Barros Schaun

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, PPGMMat, do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Modelagem Matemática

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Claudio Zen Petersen – Orientador (UFPel)

Profa. Dra. Fernanda Tumelero – Co-Orientadora (UFPel)

Profa. Dra. Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez (FURG)

Profa. Dra. Celina Ceolin (UFSM)

Prof. Dr. Júlio César Lombaldo (UFRGS)

Prof. Dr. Marcelo Schramm (UFPel)

Pelotas, 6 de Maio de 2021

RESUMO

SCHAUN, Natália Barros. **Solução das equações da Cinética Pontual de Nêutrons com efeitos de temperatura e venenos: Um estudo de caso do acidente em Chernobyl**. 2021. 108 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2021.

Nesta dissertação, apresenta-se a solução das equações da Cinética Pontual de Nêutrons, aplicando o método de Rosenbrock. Na primeira parte deste trabalho, com o intuito de verificar a metodologia, consideram-se um e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados para reatividades do tipo: constante, rampa, quadrática, senoidal, zig-zag e fonte pulsada. Na segunda parte, inclui-se nas equações citadas os efeitos de temperatura e, em seguida, os venenos no comportamento final da densidade de nêutrons. Posteriormente, realiza-se um estudo de caso do acidente em Chernobyl com o intuito de simular as características preliminares às do acidente, onde analisam-se os efeitos em conjunto dos venenos e os de temperatura no reator nuclear. Os resultados numéricos obtidos são comparados aos encontrados na literatura, os quais alcançaram boa precisão a medida que o passo de tempo é reduzido, garantindo a superação da rigidez do sistema. A simulação das características do acidente em Chernobyl produziram resultados fisicamente coerentes com o esperado. Deste modo, este estudo contribui para garantir a operação de reatores nucleares com segurança, analisando o comportamento da densidade de nêutrons para diferentes inserções de reatividades. Além disso, este estudo contribuiu para salientar a importância dos efeitos de temperatura e, principalmente dos venenos no comportamento final da potência, extremamente relevantes para a tomada de decisão na operação e segurança de uma usina nuclear.

Palavras-chave: Equações da Cinética Pontual de Nêutrons, Efeito de temperatura, Efeito dos venenos, Método de Rosenbrock.

ABSTRACT

SCHAUN, Natália Barros. **Solution of Neutron Point Kinetics equations with temperature and poison effects: A case study of the Chernobyl accident.** 2021. 108 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2021.

In this dissertation, the solution of the equations of the Neutron Point Kinetics is presented, applying the Rosenbrock method. In the first part of this work, in order to verify the methodology, one and six groups of delayed neutron precursors are considered for reactivities of the type: constant, ramp, quadratic, sine, zig-zag and pulsed source. In the second part, the effects of temperature and then poisons on the final behavior of the neutron density are included in the cited equations. Subsequently, a case study of the Chernobyl accident is performed in order to simulate the preliminary characteristics of the accident, where the joint effects of poisons and temperature in the nuclear reactor are analyzed. The numerical results obtained are compared to those found in the literature, which achieved good accuracy as the time step is reduced, ensuring the overcoming of the system stiffness. The simulation of the characteristics of the accident at Chernobyl produced results that were physically consistent with the reference data. Thus, this study contributes to ensuring the safe operation of nuclear reactors by analyzing the behavior of the neutron density for different reactivity insertions. Besides, this study contributed to highlight the importance of temperature effects and especially poisons in the final power behavior, extremely relevant for decision making in the operation and safety of a nuclear power plant.

Keywords: Neutron Point Kinetics Equations, Temperature Effect, Poisons Effect, Rosenbrock's method.

Lista de Figuras

Figura 1	Alargamento Doppler das ressonâncias com o aumento da temperatura	32
Figura 2	Seção de choque de absorção neutrônica do Xenônio-135 em função da energia do nêutron incidente	35
Figura 3	Seção de choque de absorção neutrônica do Samário-149 em função da energia do nêutron incidente	35
Figura 4	Transiente de reatividade Xenônio-135 após o desligamento de quatro níveis de fluxo diferentes	38
Figura 5	Transiente de reatividade Samário-149 após o desligamento de quatro níveis de fluxo diferentes	40
Figura 6	Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = -1\beta$.	68
Figura 7	Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = -0,5\beta$.	69
Figura 8	Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = 0,5\beta$.	69
Figura 9	Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = 1\beta$.	70
Figura 10	Densidade de nêutrons para reatividade rampa de 0 a 8 segundos.	70
Figura 11	Densidade de nêutrons para reatividade quadrática $\rho(t) = at + bt^2$.	71
Figura 12	Densidade de nêutrons para reatividade zig-zag de 0 a 2 segundos.	71
Figura 13	Densidade de nêutrons para reatividade senoidal $\rho(t) = 0,00073 \text{ sen}(t)$	72
Figura 14	Densidade de nêutrons para reatividade fonte pulsada.	72
Figura 15	Temperatura para reatividade $\rho = 1\beta$	76
Figura 16	Temperatura para reatividade $\rho = 1,5\beta$	77
Figura 17	Temperatura para reatividade $\rho = 2\beta$	77
Figura 18	Densidade de nêutrons para reatividade constante $\rho = -0,0001$ com efeitos dos venenos.	84
Figura 19	Concentração de precursores de nêutrons atrasados com $\rho = -0,0001$	85
Figura 20	Concentração de Xenônio-135 com $\rho = -0,0001$	85
Figura 21	Concentração de Samário-149 com $\rho = -0,0001$	86
Figura 22	Densidade de nêutrons para reatividade constante $\rho = 0,01\beta$ com efeitos dos venenos.	87
Figura 23	Concentração de precursores de nêutrons atrasados com $\rho = 0,01\beta$	88
Figura 24	Concentração de Xenônio-135 com $\rho = 0,01\beta$	88
Figura 25	Concentração de Promécio-149 com $\rho = 0,01\beta$	89
Figura 26	Concentração de Samário-149 com $\rho = 0,01\beta$	89
Figura 27	Intervalos do acidente em Chernobyl.	91

Figura 28	Gráficos do Intervalo I, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.	96
Figura 29	Gráficos do Intervalo II, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.	97
Figura 30	Gráficos do Intervalo III, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.	98
Figura 31	Gráficos do Intervalo IV, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.	99
Figura 32	Gráficos do Intervalo V, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.	100
Figura 33	Gráficos do Intervalo VI, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.	101

Lista de Tabelas

Tabela 1	Parâmetros nucleares dos precursores de nêutrons atrasados para alguns elementos combustíveis.	27
Tabela 2	Unidades e reatividade correspondente.	30
Tabela 3	Condições de ordem para as fórmulas de Rosenbrock.	55
Tabela 4	Valores do parâmetro livre Ω para os quais A- e L-estabilidades são alcançados.	57
Tabela 5	Parâmetros para o método Rosenbrock de quarta ordem com quatro estágios.	59
Tabela 6	Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 2 \times 10^{-5}$ s.	60
Tabela 7	Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 5 \times 10^{-4}$ s.	61
Tabela 8	Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 3 \times 10^{-5}$ s.	61
Tabela 9	Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 5 \times 10^{-5}$ s.	61
Tabela 10	Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade constante.	63
Tabela 11	Desvios Relativos para inserção de reatividade constante com $\Delta t = 0,0001$ s.	63
Tabela 12	Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade rampa.	64

Tabela 13	Desvios Relativos para inserção de reatividade rampa com $\Delta t = 0,00001s$	64
Tabela 14	Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade senoidal com seis grupos de precursores de nêutrons atrasados.	65
Tabela 15	Desvios Relativos para inserção de reatividade senoidal com $\Delta t = 0,00001s$	66
Tabela 16	Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade zig-zag.	66
Tabela 17	Desvios Relativos para inserção de reatividade zig-zag com $\Delta t = 0,00001s$	67
Tabela 18	Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade fonte pulsada.	67
Tabela 19	Desvios Relativos para inserção de reatividade fonte pulsada com $\Delta t = 0,00001s$	68
Tabela 20	Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade constante com realimentação de temperatura.	74
Tabela 21	Desvios relativos para inserção de reatividade constante com realimentação de temperatura.	75
Tabela 22	Densidade de nêutrons em cm^{-3} com <i>feedback</i> $B = 10^{-11}$ e diferentes casos de reatividade do tipo rampa.	79
Tabela 23	Densidade de nêutrons em cm^{-3} com <i>feedback</i> $B = 10^{-13}$ e diferentes casos de reatividade do tipo rampa.	80
Tabela 24	Desvios relativos para inserção de diferentes casos de reatividade do tipo rampa com <i>feedback</i> $B = 10^{-11}$ para $\Delta t = 0,0001/2s$	81
Tabela 25	Desvios relativos para inserção de diferentes casos de reatividade do tipo rampa com <i>feedback</i> $B = 10^{-13}$ para $\Delta t = 0,0001/2s$	82

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ECPN	Equações da Cinética Pontual de Nêutrons
ROS	Método de Rosenbrock
SACL	Sistema Automático de Controle Local
SAC	Sistema Automático de Controle
R-K	(Método de) Runge-Kutta
IRK	(Método de) Runge-Kutta Implícito
SDIRK	(Método de) Runge-Kutta Isoladamente Diagonal implícito
DIRK	(Método de) Runge-Kutta diagonalmente implícito
PAM	Método da Aproximação Polinomial
EPCA	Enhanced Piecewise Constant Approximation
NAM	New Analytic Method
BEFD	Backward Euler Finite Diference
CNEN	Comissão Nacional de Energia Nuclear
RBMK	Reaktor Bolshoy Moshchnosty Kanalnyy (Reator Canalizado de Alta Potência)
EDO	Equações Diferenciais Ordinárias

LISTA DE SÍMBOLOS

φ	Autofunção
ω	Autovalor
$\mathcal{B}^2$	<i>Buckling</i> material, cm^{-2}
D	Coefficiente de difusão de nêutrons, cm
$D(\mathbf{r})$	Coefficiente de difusão de nêutrons na posição $\mathbf{r}$, cm
λ	Constante de decaimento, $\text{s}^{-1} \setminus \text{h}^{-1}$
λ_i	Constante de decaimento para o grupo i de precursores, $\text{s}^{-1} \setminus \text{h}^{-1}$
$C_i(\mathbf{r}, t)$	Concentração de precursores de nêutrons atrasados na posição $\mathbf{r}$ para o grupo i de precursores no tempo t , cm^{-3}
$C_i(t)$	Concentração de precursores de nêutrons atrasados no tempo t , cm^{-3}
$\mathcal{L}$	Comprimento de difusão de nêutrons, cm
$\mathcal{K}_{eff}$	Coefficiente de multiplicação efetivo
$\mathcal{K}_{\infty}$	Coefficiente de multiplicação infinito
H	Constante de proporcionalidade entre temperatura e potência, K/MWs
α	Coefficiente de temperatura da reatividade, K^{-1}
C_I	Concentração do elemento Iodo-135 no tempo t , cm^{-3}
λ_I	Constante de decaimento do elemento Iodo-135, $\text{s}^{-1} \setminus \text{h}^{-1}$
$C_{Xe}(t)$	Concentração do elemento Xenônio-135 no tempo t , cm^{-3}
λ_{Xe}	Constante de decaimento do elemento Xenônio-135, $\text{s}^{-1} \setminus \text{h}^{-1}$
$C_{Pm}(t)$	Concentração do elemento Promécio-149 no tempo t , cm^{-3}
λ_{Pm}	Constante de decaimento do elemento Promécio-149, $\text{s}^{-1} \setminus \text{h}^{-1}$
$C_{Sm}(t)$	Concentração do elemento Samário-149 no tempo t , cm^{-3}
B	Coefficiente de desligamento
$n(\mathbf{r}, t)$	Densidade de nêutrons na posição $\mathbf{r}$ e no tempo t , cm^{-3}
$n(t)$	Densidade de nêutrons no tempo t , cm^{-3}
N	Densidade atômica do material, cm^{-3}

$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$	Densidade de corrente de nêutrons na posição $\mathbf{r}$ e no tempo t , $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
N	Densidade atômica do material, cm^{-3}
Z	Elemento
W	Elemento
S	Estágios do método de Rosenbrock
$\phi(\mathbf{r}, t)$	Fluxo escalar de nêutrons na posição $\mathbf{r}$ e no tempo t , $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$
β	Fração de nêutrons atrasados
β_i	Fração de nêutrons atrasados para o grupo i de precursores
K	Grau do polinômio de Laguerre
k_i	i -ésimo estágio do método de Rosenbrock
∇^2	Laplaciano
J_F	Matriz Jacobiana de F
I	Matriz Identidade
γ_{I}	Produção pela fissão do elemento Iodo-135
γ_{Xe}	Produção pela fissão do elemento Xenônio-135
γ_{Pm}	Produção pela fissão do elemento Promécio-149
γ_{Sm}	Produção pela fissão do elemento Samário-149
h	Passo de integração
Ω	Parâmetro do método de Rosenbrock
α_{ij}	Parâmetros do método de Rosenbrock
c_{ij}	Parâmetros do método de Rosenbrock
b_i	Parâmetros do método de Rosenbrock
c_i	Parâmetros do método de Rosenbrock
e_i	Parâmetros do método de Rosenbrock
$P(t)$	Potência Térmica no tempo t , MWt
$\mathcal{T}$	Período do reator, h^{-1}
L	Polinômios de Laguerre
$\rho(t, T)$	Reatividade no instante t e na temperatura T
ρ_0	Reatividade no tempo $t = 0$
$\rho(t)$	Reatividade no tempo t
Σ	Seção de choque macroscópica, cm^{-1}
σ	Seção de choque microscópica, cm^2
Σ_f	Seção de choque macroscópica de fissão, cm^{-1}
$\Sigma_f(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de fissão na posição $\mathbf{r}$, cm^{-1}

Σ_a	Seção de choque macroscópica de absorção, cm^{-1}
$\Sigma_a(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de absorção na posição $\mathbf{r}$, cm^{-1}
$\mathcal{S}$	Superfície, cm^2
$\sigma_{a,\text{Xe}}$	Seção de choque microscópica de absorção do elemento Xenônio-135, cm^2
$\sigma_{a,\text{Pm}}$	Seção de choque microscópica de absorção do elemento Promécio-149, cm^2
$\sigma_{a,\text{Sm}}$	Seção de choque microscópica de absorção do elemento Samário-149, cm^2
l	Tempo médio de vida do nêutron, s
Λ	Tempo médio de geração entre o nascimento do nêutron e posterior colisão, s\ h
$T(t)$	Temperatura no tempo t , K
v	Velocidade do nêutron, cm/s
V	Volume arbitrário, cm^3

Sumário

1	Introdução	15
2	Cinética de reatores nucleares	23
2.1	Construção do modelo	24
2.2	Importância dos nêutrons atrasados	26
2.3	Derivação das equações da Cinética Pontual de Nêutrons	28
2.4	As equações da Cinética Pontual de Nêutrons com os efeitos de temperatura	31
2.5	As equações da Cinética Pontual de Nêutrons com os efeitos dos venenos	33
2.5.1	Seções de choque	33
2.5.2	Produção e Remoção de Xenônio-135	36
2.5.3	Produção e Remoção de Samário-149	39
2.5.4	O modelo das equações da Cinética Pontual de Nêutrons com um grupo de precursores de nêutrons atrasados incluindo os efeitos dos venenos	40
3	O acidente em Chernobyl	42
3.1	Histórico	42
3.2	Visão técnica do acidente	43
3.2.1	Sequência de eventos	43
4	Metodologia de solução dos Modelos via método de Rosenbrock	49
4.1	Método de Rosenbrock	49
4.2	Desenvolvimento do método	50
4.3	Condições de ordem	54
4.4	Estabilidade	55
4.5	Implementação do método	58
5	Resultados	60
5.1	Inserção de Reatividade Constante	62
5.2	Inserção de Reatividade dependente do tempo	64
5.2.1	Inserção de Reatividade Rampa	64
5.2.2	Inserção de Reatividade Quadrática	64
5.2.3	Inserção de Reatividade Senoidal	65
5.2.4	Inserção de Reatividade zig-zag	66
5.2.5	Inserção de Reatividade Fonte Pulsada	67
5.3	Inserção de Reatividade Constante com Realimentação de Temperatura	73
5.4	Inserção de Reatividade Rampa com <i>feedback</i> Newtoniano	78
5.5	Inserção de Reatividade Constante com os efeitos dos venenos	83

6	Simulação do acidente em Chernobyl	91
7	Conclusões e perspectivas futuras	102
	Referências	107

1 INTRODUÇÃO

No final do século XIX e na primeira metade do século XX, iniciou-se uma incessante pesquisa tanto experimental quanto teórica sobre a estrutura atômica. Em 1803, John Dalton, químico inglês, lançou sua teoria de que toda a matéria é composta por partículas indivisíveis denominadas átomos. Porém, ao longo do século XIX, essa teoria começou a ser modificada, e já no século XX, passou a não ser mais considerada uma teoria irrefutável.

O francês Henri Becquerel, em 1896, descobriu radioatividade no elemento Urânio, o que fulminou a ideia de divisibilidade do átomo. Nessa época, a polonesa Marie Curie juntamente com seu marido Pierre Curie adentraram a pesquisar a fundo sobre o novo acontecimento e, então, descobriram que outros elementos químicos, além do Urânio, também eram radioativos, como os elementos Rádio, Polônio e o Tório. Um ano após, o inglês John Joseph Thomson descobriu os elétrons, partículas muito menores que compõem os átomos, com isso, a indivisibilidade do átomo passou a não ser mais considerada uma teoria forte de ser sustentada. Todavia, ainda necessitava-se de uma comprovação científica do fato, até que em 1910, Ernest Rutherford e Frederick Soddy confirmaram experimentalmente em seus trabalhos a divisibilidade atômica fazendo com que Rutherford, em 1911, descobrisse o núcleo do átomo.

Durante os anos seguintes, pesquisas relacionadas ao núcleo atômico foram realizadas, desencadeando a descoberta de novas partículas que compõem o interior do núcleo, tais como partículas com carga elétrica positiva, denominada prótons e as partículas sem carga elétrica, denominados nêutrons. A existência dos nêutrons foi confirmada em laboratório apenas em 1931 por James Chadwick.

Em 1932, pesquisas levaram Werner Heisenberg a descobrir um dos importantes fenômenos da ciência nuclear, a chamada atualmente de “força nuclear forte”, considerada mais poderosa que todas as outras conhecidas, que nada mais é do que uma força que une partículas do núcleo, responsável também pela emissão de alguns tipos de radiação (KNOBEL, 2000).

As investigações acerca dessa força entre as partículas do núcleo levaram Otto Hahn, Lise Meitner e Fritz Strassman, em 1939 a descobrirem a tão poderosa

fissão nuclear (RHODES, 1986). A fissão nuclear é um fenômeno que consiste na partição de um núcleo atômico, seja por bombardeamento de nêutrons, prótons ou até espontaneamente, cuja a soma das massas dos produtos de fissão é inferior a massa do átomo gerador que pela Teoria da Relatividade, conclui-se que houve liberação de energia. A fissão também libera, em média, dois ou três nêutrons que ao atingirem outros átomos próximos, por exemplo de Urânio, terminam gerando novas fissões e, assim por diante, resultando em uma reação nuclear em cadeia.

O próximo passo para a ciência seria obter uma forma de controlar essa reação em cadeia para utilizá-la como fonte de geração de energia elétrica. Porém, com a chegada da Segunda Guerra Mundial (1939-1945), estudos na área foram desviados para fins bélicos, como a obtenção de armas nucleares.

Durante o projeto de pesquisa militar Manhattan, nos Estados Unidos, liderado por Robert Oppenheimer, e composto pelos melhores físicos da época, como o italiano Enrico Fermi, o alemão Hans Bethe e o húngaro Leo Szilard, foi produzida a primeira bomba atômica com sua explosão em 1945 nas proximidades do laboratório de Los Alamos (Novo México). Em seguida, outras duas bombas criadas através do projeto foram explodidas uma sobre Hiroshima e outra em Nagasaki, no Japão, marcando assim, o fim da guerra.

Finalmente, depois da guerra, estudos com fins pacíficos na área nuclear começaram a se desenvolver. Porém, já em 1942, Fermi construiu o primeiro reator nuclear artificial, denominado Chicago Pile-1 (WOOD, 2007).

Com o decorrer do tempo, vários países objetivaram conhecer e melhorar tecnologias relacionadas à área nuclear. Foi então que os primeiros reatores nucleares de potência para a geração de energia elétrica surgiram. Com a chegada da crise do petróleo, em 1970, a energia nuclear passou a ser considerada como destaque no que se refere à geração de energia em alta escala.

A partir de então, a energia nuclear passou a contribuir de forma significativa em outras áreas da ciência, como na medicina, indústrias alimentícias e até mesmo na conservação de documentos históricos. Na medicina, com a produção de radioisótopos em grande quantidade, é possível usá-los no diagnóstico e no tratamento de várias doenças, como o câncer, usando do tratamento radioterápico como prática tradicional. Além disso, a radiação também é usada para a esterilização de materiais hospitalares e industriais. Outra contribuição dos materiais radioativos se encontra na datação radioisotópica, que permite saber com certa precisão o tempo de vida das formações rochosas a partir do decaimento radioativo de elementos (isótopos radioativos) que os contém. Para uma leitura mais completa sobre a história da energia nuclear, sugere-se o trabalho de Xavier et al. (2007).

Voltando a questão de geração de energia elétrica, a energia nuclear é uma importante alternativa energética disponível no mundo. As vantagens de sua utilização

são: não liberação de gases do efeito estufa, obedecendo aos objetivos do Protocolo de Kyoto (1997) e, mais recentemente, ao Acordo de Paris (2015); exige-se pouco espaço para sua construção; disponibilidade do combustível; é uma das fontes com maior eficácia para geração de energia; independe de fatores climáticos, além de outros.

Contudo, sua manipulação inadequada pode acabar gerando graves acidentes irreversíveis, entre os quais se destaca o acidente ocorrido em Three Mile Island (Pensilvânia) nos Estados Unidos em 1979, onde falhas humanas terminaram desestabilizando o bom funcionamento padrão do sistema de resfriamento do reator, tendo como resultado, a explosão quase total do mesmo. Outro notável acidente, destaque desta pesquisa, ocorreu em Chernobyl (Ucrânia) na antiga União Soviética em 1986. Uma explosão no reator 4, ocorrida durante um teste de segurança, fez da região inabitável para viver, resultando na exposição às radiações ionizantes de regiões da Bielorrússia, Rússia, Ucrânia e da população de diversos países europeus. Em 2011, na cidade de Fukushima, no Japão, um forte terremoto, tendo iniciado no oceano, de magnitude nove na escala Richter, desestabilizou o funcionamento do sistema de resfriamento, fazendo com que três reatores da usina explodissem, contaminando a área com radiação.

Desde o surgimento dos primeiros reatores nucleares de potência até os dias atuais, estudos objetivando a garantia da segurança processual de uma usina têm sido tema de importante relevância em física de reatores. Dados, tanto experimentais quanto teóricos, vêm sendo produzidos e analisados ao longo da história. Entretanto, os altos custos e a incerteza das pesquisas experimentais têm levado estudiosos na área a investir em modelos teóricos matemáticos que modelem de forma precisa e confiável a situação física do problema, podendo haver uma intervenção no processo, a tempo, em caso de um possível alerta de acidente.

Modelos matemáticos servem como grandes aliados para a ciência em geral, visto que explicam e tentam descrever uma dada situação física de um problema, seja ele uma simulação de dispersão de poluentes na atmosfera, simulações de reações químicas entre elementos, medição aproximada da concentração de uma substância na água, além de outros. Em física de reatores, os modelos devem levar em conta todos os aspectos, variáveis e possíveis modificações na estrutura do reator por agentes internos e externos, influenciando na reação nuclear e, conseqüentemente, na análise final no comportamento geral do reator. O modelo físico-matemático mais completo, quando dependente do tempo e considerando os nêutrons atrasados (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976), que determina a população de nêutrons é conhecido como a equação do Transporte de Nêutrons. No entanto, esse modelo é de difícil solução ao considerar em sua composição variação angular, energética, espacial e temporal nas equações. Contudo, modelos mais simples podem ser obtidos a partir de simplificações físicas coerentes dessa equação. Uma das aproximações normalmente utilizadas é

tratar a equação de Transporte como um processo difusivo, conhecida como equação da Difusão de Nêutrons (LAMARSH, 1966). Ainda assim, de acordo com a literatura, outros modelos vêm garantindo a simulação do comportamento transiente de reatores nucleares, importantes para o controle do reator. Esses modelos podem ser obtidos por meio das equações da Cinética, as quais podem ser divididas em: equações da Cinética Pontual de Nêutrons (ECPN) e equações da Cinética Espacial de Nêutrons (ECEN). As equações da Cinética Espacial consideram tanto a variação do fluxo com o tempo quanto sua deformidade espacial, em contrapartida, as equações da Cinética Pontual estão interessadas exclusivamente na variação da amplitude do fluxo com o tempo, ou seja, assumem total separabilidade no tempo e no espaço, na qual a forma espacial do fluxo é conhecida, tornando essas equações exclusivamente dependentes do tempo (PETERSEN, 2008). A importância desse modelo na física de reatores torna-se notória a medida que pode ser utilizado para uma previsão de tempo quase real da potência do reator, o que permite um controle em tempo útil e de intervenção na planta, a fim de evitar a ocorrência de acidentes graves (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976).

Muitos trabalhos têm sido publicados sobre as equações da Cinética Pontual de Nêutrons. Dentre os inúmeros estudos são citados alguns trabalhos: Em Nahla (2011) é apresentado o método *New Analytic Method* (NAM) baseado nas raízes da equação inhour usando o método Eliminação Gaussiana para resolver as ECPN com reatividades de tipo constante, rampa e *feedback* de temperatura; Mohideen Abdul Razak e Rathinasamy (2018) apresentam uma nova maneira de resolver as equações da cinética pontual inversa, usando a transformada *wavelet* de Haar, transformando as equações em um conjunto de equações lineares; Picca, Furfaro, Ganapol (2013) desenvolvem a abordagem de Aproximação Constante por Partes Melhorado (EPCA) de Kinard e Allen (2004); Aboanber, Nahla, Al-Malki (2012) utilizam o método *Analytical Perturbation* para um grupo de precursores de nêutrons atrasados com *feedback* de temperatura, com base em aproximações com pequenos parâmetros para densidade de nêutrons.

As equações da Cinética Pontual de Nêutrons formam um sistema contendo sete equações diferenciais acopladas dependentes do tempo que descreve o comportamento da população de nêutrons e também o decaimento dos precursores de nêutrons atrasados. Todavia, ao considerar a contribuição dos nêutrons atrasados no modelo, o problema passa a apresentar uma característica fundamental denominada rigidez (*Stiffness*). Isto acontece devido à grande diferença entre os tempos de vidas dos nêutrons prontos e atrasados, pois esses últimos são gerados através do decaimento dos produtos de fissão com grandezas temporais na ordem de 10^{-1} segundos a minutos (reatores térmicos), enquanto que os nêutrons prontos, gerados imediatamente após a fissão, possuem escalas temporais na ordem de 10^{-4} a 10^{-5} segundos. Os

nêutrons atrasados devem ser contabilizados mesmo representando menos de 1% da população de nêutrons no reator, pois garantem a segurança de sua operação através do controle da reação em cadeia, a medida que atrasam o tempo de resposta do reator a mudanças na reatividade. Essa particularidade exige empregar incrementos na variável temporal bastante pequenos, gerando um aumento no tempo computacional do algoritmo numérico para se obter uma solução que primeiramente convirja e, segundo, que seja suficientemente precisa (TUMELERO, 2019).

Devido à rigidez desse modelo, há a necessidade de buscar na literatura métodos numéricos que contornem essa característica. Curtiss e Hirschfelder (1952) foram os primeiros autores a verificar que os problemas rígidos necessitam de métodos implícitos devido a sua região de estabilidade ilimitada.

Diante disso, o método Rosenbrock (ROS) tem-se mostrado na literatura satisfatório na solução de problemas rígidos. Os métodos de Rosenbrock pertencem a uma das classes dos métodos Runge-Kutta. Consistem em linearizar os métodos de Runge-Kutta implícitos, facilitando assim a implementação do código, uma vez que ao invés de resolver sistemas não lineares, resolve-se uma sequência de sistemas lineares. No trabalho de Yang e Jevremovic (2009), utiliza-se o método de Rosenbrock para resolver as próprias equações da Cinética Pontual de Nêutrons com diferentes tipos de inserções de reatividade, na qual se comparam os resultados com dados de referência na literatura, considerados *benchmark* em física de reatores. Schippmann e Burchard (2011) concentraram sua atenção na investigação da eficiência computacional de Rosenbrock em comparação com os métodos de Runge-Kutta e Patankar. Em Galina (2016) apresentam-se soluções numéricas para problemas rígidos de cadeias de decaimento radioativo envolvendo cadeias naturais e artificiais por meio do método Rosenbrock produzindo resultados consistentes. Recentemente, na cinética química, Sehnem (2018) utiliza o método para resolver um sistema rígido de equações diferenciais ordinárias com o objetivo de moderar o grau de rigidez e diminuir o número de espécies envolvidas na combustão do elemento metano. Como conclusão, o método Rosenbrock mostrou alta precisão, alta eficiência e caráter estável de solução.

Ainda que se tenha na literatura solução analítica e semi-analítica para as equações da Cinética Pontual de Nêutrons, como nos trabalhos de Petersen (2008) e Ceolin (2010), que fazem uso das transformadas integrais para solução deste sistema de equações diferenciais, métodos numéricos garantem facilidade e rapidez na obtenção de resultados devido ao grande aumento da capacidade computacional dos computadores nos últimos anos e das linguagens de programação, que extraem de forma muito mais eficaz esses ganhos computacionais. Neste trabalho, por exemplo, inclui-se ao modelo, além dos efeitos da temperatura no reator, os efeitos dos venenos, aumentando assim, a complexidade do problema.

É importante levar em consideração nas equações da Cinética Pontual de Nêutrons

os efeitos de temperatura no modelo, podendo a reatividade sofrer ao longo do tempo alterações que estarão fora do controle do operador. Muitos trabalhos já foram feitos acoplando-se os efeitos de temperatura ao modelo, dentre alguns deles pode-se citar o de Tashakor, Jahanfarnia e Hashemi-Tilehnoee (2010) onde desenvolvem uma solução numérica, considerando, além da realimentação de temperatura, a queima de combustível, usando apenas um grupo de precursores de nêutrons atrasados em seu trabalho. Em Silva (2011) os autores usam o método da decomposição presente em Petersen (2008) para obter uma solução analítica do problema, onde a não linearidade é tratada utilizando os polinômios de Adomian. Aboanber e Nahla, Al-Malki (2012) utilizam o método *Analytical Perturbation* para um grupo de precursores de nêutrons atrasados com realimentação de temperatura, baseado em aproximações com pequenos parâmetros para a densidade de nêutrons. Tumelero (2015) apresenta uma solução das equações da Cinética Pontual aplicando o método da aproximação polinomial, considerando os efeitos de temperatura no reator.

Os venenos produzidos pelo decaimento dos produtos de fissão desempenham um papel fundamental em escalas longas de tempo e em situações específicas no reator nuclear. O reator quatro de Chernobyl, por exemplo, trabalhando com a potência muito abaixo do padrão durante um longo período de tempo, fez com que o Xenônio-135, derivado do decaimento radioativo do Iodo-135 e um importante absorvedor de nêutrons, contaminasse a atmosfera do reator, gerando assim, instabilidade que foi crucial para o desastre, além de outros fatores que serão abordados no capítulo 3. Na literatura, ainda existem poucos trabalhos envolvendo os efeitos dos venenos no reator nuclear. Dentre eles, pode-se citar o de Espinosa (2016) que trabalha com as equações da Cinética Pontual de Nêutrons levando em conta os efeitos dos venenos Xenônio-135 e Samário-149, no qual o novo sistema de equações é resolvido através de um método de decomposição que expande os termos não lineares em uma série infinita obtendo um sistema recursivo, tratando a não linearidade pelos polinômios de Adomian. Recentemente, Paganim et al. (2020) resolvem as ECPN considerando não apenas os efeitos dos principais venenos de nêutrons, mas também os efeitos de alguns transurânios pelo mesmo método de Espinosa (2016), obtendo resultados coerentes com os esperados.

Encontram-se também na literatura trabalhos que simulam o acidente de Chernobyl, principalmente nos segundos finais de excursão da potência, na qual pode-se destacar o de Fletcher (1988) que analisa o comportamento da planta durante o acidente em Chernobyl. Ele utiliza para a análise o código de computador RELAP5/MOD2. RELAP5/MOD2 é um código de computador avançado projetado para a melhor estimativa termo-hidráulica na análise de transientes em reatores de água leve. Em Yochida et al. (1986) utiliza-se o código RETRAN-02 / MOD2 (2) e analisa-se o comportamento termo-hidráulico do circuito primário durante a excursão de potência.

Pode-se destacar também o relatório completo de Chan et al. (1988) que apresenta as características dos eventos antes do acidente, como a distribuição do fluxo e da potência. Em seu trabalho utiliza o código cinético nodal STABIL para calcular o comportamento neutrônico do reator durante o acidente. STABIL é um código computacional que resolve um sistema nodal de equações cinéticas, similar às equações da Cinética Pontual, porém a análise considera diferentes zonas dentro do reator. Como resultados apresenta potência do reator, temperaturas do combustível, as temperaturas axial, radial e variação dos parâmetros-chave para o núcleo do reator.

Neste trabalho, a título de verificação da metodologia, compara-se, em um primeiro momento, a metodologia proposta com casos clássicos da literatura, considerando as ECPN com um e seis grupos de precursores, reatividade constante e dependente do tempo e, de forma independente, os efeitos dos venenos e de temperatura com os resultados presentes na literatura.

Após a verificação da metodologia, o objetivo é resolver as equações da Cinética Pontual de Nêutrons, considerando tanto os efeitos dos venenos quanto os de temperatura no reator através do método Rosenbrock, obtendo um sistema de equações acopladas não lineares rígidas. A proposta é simular as características preliminares do acidente em Chernobyl considerando uma escala longa de tempo, a fim de mostrar o comportamento final da potência térmica, concentração de precursores, dos venenos absorvedores de nêutrons e da temperatura no reator.

A presente dissertação segue esquematizada da seguinte forma: no capítulo 2, apresentam-se conceitos de física de reatores juntamente com a derivação das equações da Cinética Pontual de Nêutrons. Ainda neste capítulo, mostra-se a construção do modelo, considerando os efeitos de temperatura com seis grupos de precursores de nêutrons atrasados e, em seguida, o modelo com os venenos com um grupo de precursores. No capítulo 3, expõe-se a descrição do acidente no reator 4 de Chernobyl sob uma visão técnica do acidente, salientado assim, a importância em se considerar os efeitos dos venenos na modelagem das equações que governam o processo transiente de longa escala. No capítulo 4, mostra-se a explicação e o desenvolvimento do método de Rosembrock, suas condições de ordem e de estabilidade. No capítulo 5, expõem-se e analisam-se os resultados obtidos com simulações numéricas. Primeiro, apresentam-se os resultados obtidos através do modelo tradicional da Cinética Pontual para um e seis grupos de precursores, considerando reatividades do tipo: constante, rampa, quadrático, zig-zag, senoidal e fonte pulsada . Após, apresentam-se os resultados para inserção de reatividade constante e do tipo rampa para seis grupos de precursores com efeitos de temperatura. Por fim, ainda neste capítulo, apresentam-se os resultados para inserção de reatividade constante considerando um grupo de precursores de nêutrons atrasados e efeitos dos principais venenos absorvedores de nêutrons. Para esses casos mencionados,

os resultados são comparados com os presentes na literatura a fim de verificar a metodologia. No capítulo 6, apresenta-se a simulação do acidente em Chernobyl, trazendo a metodologia proposta e seus respectivos resultados. No capítulo 7, apresentam-se as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

2 CINÉTICA DE REATORES NUCLEARES

Neste capítulo, realiza-se uma abordagem dos modelos físicos usados no estudo da Cinética Pontual de Nêutrons. Parte-se de uma breve explicação do modelo de difusão de nêutrons. Após, considera-se que todos os nêutrons são caracterizados por uma única velocidade, ou energia, com o intuito de obter, dentro da teoria da difusão, o modelo da difusão monoenergético de nêutrons. Por fim, segue-se desse modelo monoenergético, considerando 6 grupos de precursores de nêutrons atrasados, para se chegar nas equações da Cinética Pontual de Nêutrons, abordadas nesta dissertação.

O grande enfoque em física de reatores é a distribuição dos nêutrons que determina a taxa na qual várias reações nucleares ocorrem dentro do reator. Além disso, estudando o comportamento da população de nêutrons, pode-se tomar medidas que controlem a reação em cadeia, permitindo estabilidade e segurança no reator nuclear.

A base da física de reatores parte da investigação do processo de transporte de nêutrons. A equação de transporte de nêutrons é o modelo mais completo que descreve deterministicamente o comportamento dos nêutrons em um meio material. Ela é uma equação íntegro-diferencial que possui sete variáveis em sua composição: três variáveis espaciais, duas variáveis angulares, uma energética e outra temporal. Porém, a equação de transporte de nêutrons se torna de difícil solução. Diante disso, utiliza-se uma forma aproximada deste modelo, conhecida como equação de difusão.

A maior parte dos estudos de reatores nucleares trata o movimento de nêutrons como um processo difusivo. No entanto, este modelo apresenta-se menos preciso em algumas partes específicas do reator nuclear, por exemplo, perto de um material altamente absorvedor, dado por um elemento de controle. Na teoria da difusão, o modelo monoenergético assume que todos os nêutrons podem ser caracterizados por uma única energia cinética (velocidade). Apesar de ser um modelo simplificado, ele pode ser usado para obter uma análise preliminar dos cálculos globais de reatores nucleares. No entanto, é válido ressaltar que o intervalo de energia dos nêutrons pode variar de oito a nove ordens de magnitude (aproximadamente de 0,01 eV até 100 MeV). Quando nêutrons são produzidos imediatamente após o processo de fissão nuclear possuem, em geral, altas energias (por volta de 1 MeV a 100 MeV), denominados

nêutrons rápidos. Através do processo de moderação, no qual cedem energia ao meio devido a choques sucessivos com os núcleos dos átomos, igualam-se a energia média de agitação térmica das moléculas do meio, atingindo energias intermediárias, chamados de nêutrons intermediários. Quando alcançam energias baixas, próximas a energia térmica, ou seja, em processo de termalização, na qual atingem o equilíbrio térmico, denominam-se nêutrons térmicos. Neste trabalho, constrói-se o modelo de difusão monoenergético de nêutrons ou de uma velocidade, visto que a modelagem matemática é similar para o caso contendo vários grupos de energia, para então se chegar nas equações da Cinética Pontual de Nêutrons.

2.1 Construção do modelo

A distribuição de nêutrons em um reator nuclear é dada pela densidade de nêutrons $n(\mathbf{r}, t)$ em $[\text{cm}^{-3}]$, que fornece o número de nêutrons por unidade de volume em uma posição $\mathbf{r}$ no tempo t . No entanto, de acordo com Duderstadt (1976), a densidade da taxa em que uma reação acontece no reator é representada pelo produto do fluxo de nêutrons pela seção de choque macroscópica correspondente ao evento considerado (fissão, espalhamento, captura). A seção de choque macroscópica Σ em $[\text{cm}^{-1}]$ é definida como sendo a área alvo total oferecida por todos os núcleos contidos em uma unidade de volume, ou melhor, é definida como a probabilidade por unidade de percurso para que haja reação do nêutron com o meio. Então, convenientemente, para um estudo geral da variação da população de nêutrons no reator, usa-se o fluxo escalar de nêutrons, definido como: $\phi(\mathbf{r}, t) = vn(\mathbf{r}, t)$, em que v representa a velocidade dos nêutrons em $[\text{cm s}^{-1}]$.

Considera-se que a taxa de variação temporal de nêutrons em um volume arbitrário é dada pela diferença entre a produção de nêutrons e a perda, seja por absorção ou fuga.

Parte-se considerando um volume arbitrário V , denominado volume de controle, de área de superfície S , localizado em qualquer lugar dentro do reator. Cautelosamente, analisa-se esse volume V para determinar o comportamento da população de nêutrons, obtendo matematicamente a variação dos nêutrons nessa região escolhida.

O número total de nêutrons em V em cada instante t pode ser obtido integrando sobre o volume, representado como

$$\int_V d^3r n(\mathbf{r}, t) = \int_V d^3r \frac{1}{v} \phi(\mathbf{r}, t). \quad (1)$$

Derivando a Equação (1), obtém-se a taxa de variação de tempo do número de nêutrons em V

$$\frac{d}{dt} \left[\int_V d^3r \frac{1}{v} \phi(\mathbf{r}, t) \right] = \int_V d^3r \frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (2)$$

Isso corresponde ao seguinte balanço:

Taxa de variação = Taxa de Produção em V - Taxa de Absorção em V - Taxa de fuga por S .

Pode-se modelar matematicamente esses termos escrevendo expressões para cada um deles. Para descrever a produção, define-se uma fonte fissionável de nêutrons como o produto da densidade da taxa de fissão $\Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, t)$ pelo número médio de nêutrons emitidos pela fissão nuclear ν , em que Σ_f é a seção de choque macroscópica de fissão, então

$$\text{Taxa de Produção em } V = \int_V d^3r \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t). \quad (3)$$

Sabe-se que a taxa da densidade de absorção por unidade de volume em V é $\Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, t)$, em que Σ_a representa a seção de choque macroscópica de absorção. Logo, a taxa total de perda de nêutrons por absorção em V dada por:

$$\text{Taxa de Absorção em } V = \int_V d^3r \Sigma_a(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t). \quad (4)$$

Define-se $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ como sendo a densidade de corrente de nêutrons, então a taxa de nêutrons que passam através de um elemento de superfície $d\mathbf{S}$ no ponto $\mathbf{r}$ é $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} d\mathbf{S}$, em que $\mathbf{n}$ é a densidade de nêutrons. Logo, a taxa total de fuga pela superfície do volume V dada por:

$$\text{Taxa de Fuga por } S = \oint_S \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} d\mathbf{S}. \quad (5)$$

Para substituir as expressões (3), (4) e (5) na equação de balanço, deve-se convenientemente converter a Equação (5) em uma integral de volume. Para isto, utiliza-se o Teorema de Gauss para escrever

$$\oint_S \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{n} d\mathbf{S} = \int_V \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) d^3r. \quad (6)$$

Substituindo-se as Equações (3), (4) e (6) na equação de balanço, obtém-se

$$\int_V d^3r \left[\frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_a(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J} \right] = 0. \quad (7)$$

Já que se considera o volume arbitrário, a Equação (7) deve ser satisfeita independentemente do volume escolhido, ou seja, o integrando deve ser nulo. Logo, tem-se:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} - \Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, t) + \nu \Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, t). \quad (8)$$

Antes, deve-se recorrer à lei de Fick para conseguir relacionar as variáveis $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$, que é a densidade de corrente, e $\phi(\mathbf{r}, t)$, que corresponde ao fluxo de nêutrons. De acordo com a lei de Fick, a densidade de corrente é proporcional ao gradiente espacial negativo da densidade (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976) ou, neste caso, o fluxo. Ou seja, as partículas tenderão a fluir de regiões de alta para baixa densidade a uma taxa proporcional ao gradiente de densidade negativo. Escrevendo matematicamente obtém-se

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cong -D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}, t), \quad (9)$$

em que a constante de proporcionalidade D é conhecida como coeficiente de difusão.

Substituindo a lei de Fick na Equação (8), tem-se a equação de difusão de nêutrons monoenergéticos descrita como:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot D(\mathbf{r})\nabla\phi(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, t) + \nu \Sigma_f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}, t). \quad (10)$$

2.2 Importância dos nêutrons atrasados

A fissão nuclear é responsável pela emissão de alguns fragmentos de fissão que, quando instáveis, decaem e emitem mais nêutrons com um atraso em relação ao momento da fissão. Esses nêutrons são chamados de nêutrons atrasados e os núclídeos que os liberam, de precursores de nêutrons atrasados. Esses nêutrons emitidos pelo decaimento dos produtos de fissão são geralmente menos energéticos (energia média em torno de 0,5 MeV) que os nêutrons prontos (energia média 1 MeV), gerados simultaneamente no evento de fissão (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976). Com isso, os nêutrons atrasados possuem uma menor probabilidade de fuga do núcleo do reator devido a sua baixa energia, pois percorrem distâncias mais curtas do que os nêutrons rápidos.

Cerca de mais de 99 % dos nêutrons são produzidos instantaneamente após a fissão. A fração restante resulta do decaimento dos produtos de fissão, emissores de nêutrons atrasados. Essa fração denotada por β , geralmente fica em torno de 0,0065, ou seja, representa cerca de 0,65 % do total, no caso do combustível Urânio-235, podendo mudar conforme o elemento combustível usado. Parece ser pouco quando comparado com o percentual dos nêutrons prontos, porém os nêutrons atrasados são responsáveis

pela capacidade de controlar a resposta devido ao aumento de potência do reator. Se todos os nêutrons emitidos por fissão fossem prontos, o controle do reator seria impossível. Esses precursores de nêutrons são tipicamente agrupados em seis grupos com meias vidas variando de fração de segundo para mais de um minuto. Na Tabela 1, apresenta-se os parâmetros nucleares dos precursores de nêutrons atrasados para alguns elementos combustíveis.

Tabela 1: Parâmetros nucleares dos precursores de nêutrons atrasados para alguns elementos combustíveis.

Elemento	Grupo	λ_i (s ⁻¹)	β_i
Urânio-235	1	0,0124	0,00022
	2	0,0305	0,00142
	3	0,111	0,00127
	4	0,310	0,00257
	5	1,14	0,00075
	6	3,01	0,00027
Plutônio-239	1	0,0129	0,000076
	2	0,0311	0,000560
	3	0,134	0,000432
	4	0,331	0,000656
	5	1,26	0,000206
	6	3,21	0,000070
Urânio-233	1	0,0126	0,000224
	2	0,0334	0,000712
	3	0,131	0,000590
	4	0,302	0,000824
	5	1,27	0,000190
	6	3,13	0,000060

Fonte: Adaptado de Keepin, G.R. (1965). Physics of Nuclear Kinetics.

Define-se matematicamente β como sendo o somatório das frações de nêutrons atrasados para os seis grupos de precursores. Logo tem-se:

$$\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i. \quad (11)$$

A equação de balanço que descreve a dependência temporal da concentração dos precursores de nêutrons atrasados deve conter termos que contemplem tanto a produção através da fissão quanto as perdas causadas pelo posterior decaimento desses precursores.

A produção de nêutrons atrasados pelo grupo i pode ser representada matematicamente multiplicando-se a taxa de produção de nêutrons na fissão pela fração de nêutrons atrasados:

$$\beta_i \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t), \quad (12)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. No entanto, a perda é dada pela taxa de decaimento do precursor, expressa pela multiplicação da concentração do precursor ($C_i(\mathbf{r}, t)$) pela sua respectiva constante de decaimento (λ_i).

Portanto, a equação de balanço que representa a variação temporal da concentração de precursores de nêutrons atrasados é dada por:

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t), \quad (13)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. Logo, incluindo os nêutrons atrasados na Equação (10), têm-se as equações da Cinética Espacial de Nêutrons monoenergéticos a seguir:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta) \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -\lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (14)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$.

2.3 Derivação das equações da Cinética Pontual de Nêutrons

Partindo das equações da Cinética Espacial de Nêutrons monoenergéticos e considerando os parâmetros nucleares constantes, sem perda de generalidade, tem-se $D(\mathbf{r}) = D$, $\Sigma_a(\mathbf{r}) = \Sigma_a$ e $\Sigma_f(\mathbf{r}) = \Sigma_f$, obtendo-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= D \nabla^2 \phi(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a \phi(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta) \nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= -\lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + \beta_i \nu \Sigma_f \phi(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (15)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. Reescreve-se o fluxo $\phi(\mathbf{r}, t)$ e a concentração de precursores $C_i(\mathbf{r}, t)$ como funções separáveis do tempo e do espaço (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976), tem-se

$$\phi(\mathbf{r}, t) = v n(t) \varphi_1(\mathbf{r}) \quad (16)$$

e

$$C_i(\mathbf{r}, t) = C_i(t) \varphi_1(\mathbf{r}). \quad (17)$$

em que $\varphi_1(\mathbf{r})$ é uma solução de modo fundamental da equação de Helmholtz definida a seguir:

$$\nabla^2\varphi + \mathcal{B}^2\varphi = 0, \quad (18)$$

em que

$$\mathcal{B}^2 = \frac{(\nu\Sigma_f - \Sigma_a)}{D}, \quad (19)$$

é o chamado *buckling* material.

A equação de Helmholtz surge ao considerar o regime crítico de funcionamento de um reator, onde não se tem variação temporal do fluxo e da concentração de nêutrons.

Fisicamente, o termo $\varphi_1(\mathbf{r})$ corresponde a uma função forma, representando o formato espacial do fluxo de nêutrons, na qual supõe-se que o formato do fluxo é conhecido em um determinado intervalo de tempo, obtendo somente a variação da amplitude do fluxo com o tempo.

Define-se o tempo médio de vida do nêutron no reator como

$$l = [v\Sigma_a(1 + \mathcal{L}^2\mathcal{B}^2)]^{-1}, \quad (20)$$

em que $\mathcal{L} = \sqrt{D/\Sigma_a}$ é o comprimento de difusão de nêutrons e definindo o fator de multiplicação efetivo como

$$\mathcal{K}_{eff} = \frac{\nu\Sigma_f/\Sigma_a}{1 + \mathcal{L}^2\mathcal{B}^2} = \frac{\mathcal{K}_\infty}{1 + \mathcal{L}^2\mathcal{B}^2}, \quad (21)$$

em que $\mathcal{K}_\infty = \nu\Sigma_f/\Sigma_a$ é o fator de multiplicação infinita relativo ao número de nêutrons produzidos pelos nêutrons absorvidos. Portanto, assumindo que a função $\varphi_1(\mathbf{r})$ satisfaz a equação (18) e realizando alguns algebrismos, chega-se a um conjunto de equações diferenciais ordinárias para $n(t)$ e $C_i(t)$:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(1 - \beta)\mathcal{K}_{eff} - 1}{l}n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t). \quad (22)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \beta_i \frac{\mathcal{K}_{eff}}{l}n(t) - \lambda_i C_i(t), \quad (23)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. Para mais detalhes da modelagem, ver em Petersen (2011). Conforme Duderstadt e Hamilton (1976), introduz-se ainda

$$\Lambda = \frac{l}{\mathcal{K}_{eff}}, \quad (24)$$

como sendo o tempo médio de geração entre o nascimento do nêutron e a sua subsequente colisão. Outra definição adicionada é a reatividade, que é a taxa líquida instantânea de produção de nêutrons dividida pela taxa de produção instantânea devido

a fissão, considerada o principal termo da equação e definida matematicamente como

$$\rho(t) = \frac{\mathcal{K}_{eff}(t) - 1}{\mathcal{K}_{eff}(t)}. \quad (25)$$

Conforme dito anteriormente, o fator de multiplicação efetivo e, conseqüentemente, o valor da reatividade possuem grandes influências nas características do reator. Se $\mathcal{K}_{eff} > 1$ implica na reatividade ser maior que zero ($\rho(t) > 0$), ou seja, tem-se um sistema supercrítico (o número de fissões e a população de uma geração é maior que a geração anterior). Caso contrário, se $\mathcal{K}_{eff} < 1$, implica na reatividade ser menor que zero ($\rho(t) < 0$), obtendo assim, um sistema dito subcrítico (o número de fissões e a população de uma geração é menor que a geração anterior). E, por fim, o sistema é dito crítico ou estacionário (o número de fissões e a população de uma geração é igual a geração anterior) se $\mathcal{K}_{eff} = 1$, implicando na reatividade ter valor nulo ($\rho(t) = 0$). Existem ainda, três possibilidades de caracterização do sistema dentro do caso supercrítico, são elas: subpronto-crítico quando $\rho(t) < \beta$, pronto-crítico quando $\rho(t) = \beta$ e superpronto-crítico quando $\rho(t) > \beta$. Na tabela 2 são apresentadas unidades representativas geralmente utilizadas para a reatividade, apesar de ser uma variável adimensional.

Tabela 2: Unidades e reatividade correspondente.

Unidades	Reatividade
1%	0,01
1ΔK	0,0001
1\$	β
1pcm	0,00001

Portanto, com as definições (24) e (25) pode-se reescrever as Equações (22) e (23) como:

$$\begin{aligned} \frac{dn(t)}{dt} &= \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t), \\ \frac{dC_i(t)}{dt} &= \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t), \end{aligned} \quad (26)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. Logo, tem-se um conjunto de sete equações diferenciais ordinárias acopladas dependentes do tempo que descreve a dependência temporal da população de nêutrons e da concentração dos precursores de nêutrons atrasados no reator, denominado modelo da Cinética Pontual de Nêutrons. São aplicadas as seguintes

condições iniciais ao problema:

$$\begin{aligned} n(0) &= n_0, \\ C_i(0) &= \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0, \end{aligned} \quad (27)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$.

2.4 As equações da Cinética Pontual de Nêutrons com os efeitos de temperatura

Os efeitos da temperatura têm uma influência importante na operação de um reator e na segurança do sistema. Em geral, simulações mais realísticas de reatores nucleares são modeladas por equações não lineares da termodinâmica, como os efeitos da temperatura, pressão e outros efeitos decorrentes. A inserção de realimentação de temperatura ocasiona mudanças pertinentes no fluxo de nêutrons que, conseqüentemente, altera a potência do reator. O efeito Doppler, por exemplo, pode alterar ao longo do tempo a população de nêutrons devido a sua contribuição no aumento da taxa de absorção de nêutrons. Fisicamente, esse efeito acontece quando a população de nêutrons aumenta, o número de reações por fissão também aumenta, ocasionando um aquecimento da região dos elementos combustíveis. O aumento na temperatura causa um alargamento da região da ressonância, necessitando que os nêutrons incidentes atravessem um intervalo de energia maior antes de alcançar a região térmica, aumentando a possibilidade de serem absorvidos ainda na região de ressonância. Em outras palavras, com mais calor, à medida que a temperatura média do reator aumenta, o refrigerante e o moderador se expandem e se tornam menos densos, diminuindo suas eficácias na desaceleração e fugas de nêutrons. Esse aumento na temperatura do combustível ampliará a seção de choque de absorção, causando um maior número de absorções de nêutrons lentos pelo Urânio-238. Este aumento nas absorções faz com que diminuam as fissões no combustível nuclear e, conseqüentemente, a potência. Na Figura 1, mostra-se o alargamento da região de ressonância em decorrência do aumento de temperatura e, conseqüentemente, diminuição de altura do pico, denominado Alargamento Doppler das Ressonâncias. Porém, a área sob a ressonância se mantém inalterada, aumentando assim a absorção dos nêutrons no combustível.

Figura 1: Alargamento Doppler das ressonâncias com o aumento da temperatura

Fonte: Adaptado de Duderstadt, Hamilton (1976).

Portanto, os efeitos de temperatura podem influenciar significativamente a reatividade de um reator. Em razão disso, atribui-se, além da dependência temporal, a variável temperatura nas equações da Cinética Pontual de Nêutrons. A equação que determina a taxa de variação da temperatura ao longo do tempo, em geral, é descrita linearmente em função da densidade de nêutrons como:

$$\frac{dT(t)}{dt} = Hn(t), \quad (28)$$

em que H representa um parâmetro ligado à influência da mudança de fluxo de calor na taxa de variação de temperatura.

Com isso, alterações da temperatura sobre a reatividade e, correspondentemente, sobre o fator de multiplicação, são de extrema relevância no estudo final do comportamento da população de nêutrons no reator. Em geral, essas alterações são expressas em termos do *coeficiente de reatividade devido à temperatura* (α), onde assume-se que a temperatura do núcleo pode ser caracterizada por uma temperatura uniforme T . Logo, define-se α como:

$$\alpha = \frac{\partial \rho(t, T)}{\partial T}. \quad (29)$$

Um reator é dito ser instável com respeito à temperatura e às variações de potência quando $\alpha > 0$, o que produzirá com o aumento de temperatura um aumento também da reatividade (ρ) e, subseqüentemente, acarretará num aumento de potência, gerando novamente um aumento na temperatura, alimentando assim, um ciclo. Mais seguro

seria, então, projetar um reator que tenha o coeficiente de reatividade negativo ($\alpha < 0$), pois dessa forma, com o aumento de temperatura a reatividade diminuirá e, conseqüentemente, produzirá um decréscimo na potência do reator que, por sua vez, diminuirá a temperatura tornando-se estável. Logo, considerando uma pequena perturbação de primeira ordem, a variação da reatividade com a temperatura pode ser representada pela equação:

$$\rho(t, T) = \rho_0 - \alpha[T(t) - T(0)], \quad (30)$$

em que ρ_0 é a reatividade inicial. Então, substituindo a Equação (30) em (26), têm-se:

$$\begin{aligned} \frac{dn(t)}{dt} &= \frac{\rho_0 - \alpha[T(t) - T(0)] - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t), \\ \frac{dC_i(t)}{dt} &= \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t), \\ \frac{dT(t)}{dt} &= Hn(t), \end{aligned} \quad (31)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$, com as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned} n(0) &= n_0, \\ C_i(0) &= \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0, \\ T(0) &= T_0, \end{aligned} \quad (32)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. Portanto, no sistema (31), tem-se o modelo da Cinética Pontual de Nêutrons com realimentação de temperatura.

2.5 As equações da Cinética Pontual de Nêutrons com os efeitos dos venenos

2.5.1 Seções de choque

Como visto anteriormente, a seção de choque macroscópica é definida como sendo a probabilidade de uma dada reação ocorrer por unidade de deslocamento do nêutron, que pode ser escrita matematicamente como:

$$\Sigma = \sigma N, \quad (33)$$

em que σ representa a seção de choque microscópica, que está relacionada com a probabilidade de uma dada reação ocorrer entre um nêutron e um núcleo e sua unidade é expressa em $[\text{cm}^2]$ e N representa a densidade atômica do material em $[\text{cm}^{-3}]$.

A probabilidade de um nêutron interagir com um núcleo em uma reação particular é dependente não só do tipo de núcleo envolvido, mas também da energia do nêutron (WILLIAMS, 2010). Em geral, nêutrons com energia inferior a 1 eV, chamados de nêutrons térmicos, possuem uma maior probabilidade de serem absorvidos na maior parte dos materiais. A energia do nêutron incidente e a energia do núcleo alvo são parâmetros que possuem maior importância na determinação dos valores de seção de choque.

Durante a fissão nuclear, são gerados fragmentos de fissão que decaem radioativamente, tornando-se os chamados produtos de fissão, onde a longo prazo, tornam-se absorvedores parasitários de nêutrons. Porém, dentre os inúmeros produtos de fissão, os venenos Xenônio-135 e Samário-149 se destacam por suas seções de choque de absorção de nêutrons serem muito altas e relevantes para causar impacto na configuração e operação do reator. O veneno Xenônio-135 possui uma seção de choque de absorção de nêutrons de $2,6 \times 10^6$ barns, em que 1 barn corresponde a 10^{-24} cm², enquanto que o veneno Samário-149, considerado o segundo mais relevante em física de reatores, possui uma seção de choque de absorção de $4,1 \times 10^4$ barns. Os gráficos correspondentes das seções de choque dos venenos Xenônio-135 e Samário-149 em função da energia incidente estão representados, respectivamente, nas Figuras 2 e 3.

Nota-se que existem variações com no mínimo 6 ordens de grandeza tanto para a seção de choque, dada em barns, quanto para energia incidente (ESPINOSA, 2016). Isso significa que nêutrons rápidos praticamente não realizam nenhuma contribuição e, com isso, somente os venenos exercem influência significativa nos nêutrons térmicos.

À medida que a energia (velocidade) dos nêutrons incidentes aumenta, a seção de choque de absorção neutrônica decresce. Para ambos venenos, a seção de choque de absorção somente se torna significativa para nêutrons com energias mais baixas, considerados nêutrons térmicos. Logo, a probabilidade de um nêutron ser absorvido por um veneno aumenta quando são considerados sistemas de reatores térmicos.

Figura 2: Seção de choque de absorção neutrônica do Xenônio-135 em função da energia do nêutron incidente

Fonte: Adaptado de Espinosa (2016).

Figura 3: Seção de choque de absorção neutrônica do Samário-149 em função da energia do nêutron incidente

Fonte: Adaptado de Espinosa (2016).

2.5.2 Produção e Remoção de Xenônio-135

Como já visto, o Xenônio-135 possui uma seção de choque de absorção de nêutrons de $2,6 \times 10^6$ barns. É produzido diretamente por fissão, mas é mais comumente um produto da cadeia de decaimento do elemento Telúrio-135, como mostrado na cadeia abaixo

A meia-vida do Telúrio-135 é tão curta em comparação com as meias vidas dos outros elementos, que se pode assumir que o Iodo-135 é produzido diretamente da fissão. O Iodo-135 não é um forte absorvedor de nêutrons, mas decai para formar o veneno Xenônio-135. Estima-se que 95% de todo o Xenônio-135 produzido provém do decaimento do Iodo-135. Portanto, a meia-vida do Iodo-135 desempenha um papel importante na quantidade de Xenônio-135 presente.

De uma forma geral, pode-se representar a variação temporal da concentração de um determinado elemento Z , a partir dos termos de produção por fissão do elemento Z , produção através do decaimento do elemento W , perda através do decaimento do elemento Z e, por fim, a perda através da absorção do elemento Z . Logo, matematicamente, tem-se a seguinte equação de balanço que representa respectivamente, cada termo mencionado acima:

$$\frac{dC_Z(t)}{dt} = \gamma_Z \Sigma_f v n(t) + \lambda_W C_W(t) - \lambda_Z C_Z(t) - \sigma_{a,Z} C_Z(t) v n(t), \quad (34)$$

em que C_Z é a concentração do elemento Z , C_W é a concentração do elemento W , γ_Z é a produção pela fissão de Z , λ_W é a constante de decaimento do elemento W , λ_Z é a constante de decaimento do elemento Z e $\sigma_{a,Z}$ é a seção de choque microscópica de absorção do elemento Z .

Com esses termos e parâmetros definidos, constroem-se equações para a variação da concentração dos elementos Iodo-135 e Xenônio-135 com base na Equação (34).

A taxa de variação da concentração do Iodo-135 é dada por:

$$\frac{dC_I(t)}{dt} = \gamma_I \Sigma_f v n(t) - \lambda_I C_I(t) - \sigma_{a,I} C_I(t) v n(t). \quad (35)$$

Pode-se assumir que $\sigma_{a,I}$ é muito pequeno, mesmo em altos níveis de fluxo, logo, o termo de perda por absorção pode ser ignorado, e assim, tem-se

$$\frac{dC_I(t)}{dt} = \gamma_I \Sigma_f v n(t) - \lambda_I C_I(t). \quad (36)$$

A taxa de variação da concentração do Xenônio-135 é dada por:

$$\frac{dC_{Xe}(t)}{dt} = \gamma_{Xe}\Sigma_f vn(t) + \lambda_I C_I(t) - \lambda_{Xe} C_{Xe}(t) - \sigma_{a,Xe} C_{Xe}(t) vn(t). \quad (37)$$

Com a captura de um nêutron, o Xenônio-135 transforma-se em um isótopo estável denominado Xenônio-136, o qual não é um absorvedor significativo de nêutrons. Quando um reator é desligado, o fluxo de nêutrons e, conseqüentemente, a potência, são reduzidos a praticamente zero. Portanto, depois do desligamento, o Xenônio-135 não é mais produzido por fissão e não é mais removido por queima. O único mecanismo de produção restante é o decaimento do Iodo-135, que estava no núcleo do reator no horário do desligamento. Como a produção pelo decaimento do Iodo-135 é maior que o decaimento do Xenônio-135, a concentração do Xenônio chega a um pico em cerca de 10 a 11 horas após a diminuição da potência e, em seguida, diminui para um valor menor de equilíbrio.

A reatividade negativa gerada pela presença do Xenônio-135, também chamada de envenenamento, pode tornar o reator inoperante por algumas horas dependendo do fluxo de nêutrons. Esse período de tempo em que o reator é incapaz de “anular” os efeitos do Xenônio é chamado tempo morto do reator. Na Figura 4, nota-se que o efeito da reatividade negativa ao Xenônio-135 gera um maior pico quando o fluxo neutrônico assume um valor alto, $\phi_T = 5 \times 10^{14}$, sendo que no intervalo de t_a até t_b o reator não pode ser reiniciado devido a sua ineficiência para a retomada segura da potência.

Figura 4: Transiente de reatividade Xenônio-135 após o desligamento de quatro níveis de fluxo diferentes

Fonte: Adaptado de Lamarsh, J.R. (1972). Introduction to Nuclear Reactor Theory. Copyright by the American Nuclear Society, La Grange Park, IL.

2.5.3 Produção e Remoção de Samário-149

O Samário-149 é o segundo mais importante veneno produto da fissão, devido a sua alta seção de choque de absorção de nêutrons térmicos (aproximadamente $4,1 \times 10^4$ barns). O Samário-149 é produzido pelo decaimento do fragmento de fissão Neodímio, como mostra a cadeia abaixo

A meia-vida do Neodímio-149 é muito inferior que a do Promécio-149. Então, assume-se que o Promécio é produzido diretamente da fissão. Assim, com base na Equação (34), constroem-se equações para a variação da concentração dos elementos Promécio-149 e Samário-149.

A taxa de variação da concentração do Promécio-149 é dada por:

$$\frac{dC_{\text{Pm}}(t)}{dt} = \gamma_{\text{Pm}}\Sigma_f v n(t) - \lambda_{\text{Pm}}C_{\text{Pm}}(t) - \sigma_{a,\text{Pm}}C_{\text{Pm}}(t)v n(t). \quad (38)$$

Como $\sigma_{a,\text{Pm}}$ é insignificante, o termo de perda por absorção pode ser ignorado, e assim, tem-se

$$\frac{dC_{\text{Pm}}(t)}{dt} = \gamma_{\text{Pm}}\Sigma_f v n(t) - \lambda_{\text{Pm}}C_{\text{Pm}}(t). \quad (39)$$

E, finalmente, a taxa de variação da concentração do Samário-149 é dada por:

$$\frac{dC_{\text{Sm}}(t)}{dt} = \gamma_{\text{Sm}}\Sigma_f v n(t) + \lambda_{\text{Pm}}C_{\text{Pm}}(t) - \sigma_{a,\text{Sm}}C_{\text{Sm}}(t)v n(t). \quad (40)$$

Observa-se que o Samário-149 é estável pela cadeia de decaimento, portanto não se tem seu decaimento radioativo. E, também, desconsidera-se a produção do Samário-149 por ser próxima de zero. Logo, a equação torna-se

$$\frac{dC_{\text{Sm}}(t)}{dt} = \lambda_{\text{Pm}}C_{\text{Pm}}(t) - \sigma_{a,\text{Sm}}C_{\text{Sm}}(t)v n(t). \quad (41)$$

Diferentemente do Xenônio-135, o Samário-149 após o desligamento ou queda de potência do reator atinge um pico à medida que o Promécio-149 decai e depois permanece constante durante a operação do reator justamente por ser um elemento estável, mantendo esse equilíbrio até que o sistema volte ao estado crítico e seja removido. O ponto desse equilíbrio depende do fluxo neutrônico do sistema podendo aumentar com o aumento do fluxo, como mostra a Figura 5.

Figura 5: Transiente de reatividade Samário-149 após o desligamento de quatro níveis de fluxo diferentes

Fonte: Adaptado de Lamarsh, J.R. (1972). Introduction to Nuclear Reactor Theory. Copyright by the American Nuclear Society, La Grange Park, IL.

2.5.4 O modelo das equações da Cinética Pontual de Nêutrons com um grupo de precursores de nêutrons atrasados incluindo os efeitos dos venenos

Incluindo as equações de variação das concentrações dos elementos, Iodo-135, Xenônio-135, Promécio-149 e Samário-149 nas equações da Cinética Pontual de Nêutrons, considerando, sem perda de generalidade, apenas um grupo de precursores de nêutrons atrasados, fica-se com o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias acopladas e não linear:

$$\begin{aligned}
\frac{dn(t)}{dt} &= \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \lambda C(t) - \sigma_{a,Xe} C_{Xe}(t) v n(t) - \sigma_{a,Sm} C_{Sm}(t) v n(t), \\
\frac{dC(t)}{dt} &= \frac{\beta}{\Lambda} n(t) - \lambda C(t), \\
\frac{dC_I(t)}{dt} &= \gamma_I \Sigma_f v n(t) - \lambda_I C_I(t), \\
\frac{dC_{Xe}(t)}{dt} &= \gamma_{Xe} \Sigma_f v n(t) + \lambda_I C_I(t) - \lambda_{Xe} C_{Xe}(t) - \sigma_{a,Xe} C_{Xe}(t) v n(t), \\
\frac{dC_{Pm}(t)}{dt} &= \gamma_{Pm} \Sigma_f v n(t) - \lambda_{Pm} C_{Pm}(t), \\
\frac{dC_{Sm}(t)}{dt} &= \lambda_{Pm} C_{Pm}(t) - \sigma_{a,Sm} C_{Sm}(t) v n(t),
\end{aligned} \tag{42}$$

com condições iniciais

$$\begin{aligned}
n(0) &= n_0, \\
C(0) &= \frac{\beta}{\lambda \Lambda} n_0, \\
C_I(0) &= \frac{\gamma_I \Sigma_f v}{\lambda_I}, \\
C_{Xe}(0) &= \frac{\gamma_{Xe} \Sigma_f v + \lambda_I C_I(0)}{\lambda_{Xe} + \sigma_{a,Xe} v}, \\
C_{Pm}(0) &= \frac{\gamma_{Pm} \Sigma_f v}{\lambda_{Pm}}, \\
C_{Sm}(0) &= \frac{\lambda_{Pm} C_{Pm}(0)}{\sigma_{a,Sm} v}.
\end{aligned} \tag{43}$$

Uma vez que os venenos são gerados através de produtos de fissão de nêutrons, tendo como combustível Urânio-235, a primeira equação do sistema apresentada em (42), que descreve a variação da densidade de nêutrons, foi modificada com a inserção de dois termos, pois como os venenos são absorvedores parasitários, têm-se perdas de nêutrons devido a seção de choque de captura de Xenônio-135 e de Samário-149. Trabalha-se com escala de tempo de longa duração, a fim de obter períodos como meses, dias ou horas para melhor analisar o comportamento da variação dos venenos no reator, visto que os decaimentos do Xenônio-135 e Samário-149 são de longa duração.

3 O ACIDENTE EM CHERNOBYL

No capítulo anterior, construíram-se os modelos matemáticos que descrevem a variação da população de nêutrons em um reator nuclear. Na última seção, apresentou-se o sistema de equações incluindo a influência dos venenos no seu funcionamento. Neste capítulo, aborda-se o acidente de Chernobyl, na qual uma das causas de sua ocorrência foi justamente o negligenciamento dos efeitos do envenenamento do reator durante a realização de um teste de segurança, juntamente com erros operacionais e no projeto da usina. Para isso, inicia-se apresentando um breve histórico, a sequência de eventos no dia do acidente e as suas consequências até chegar na atualidade.

3.1 Histórico

A usina de energia atômica de Chernobyl Vladimir Lênin está localizada cerca de 183 km da cidade de Kiev, capital da Ucrânia, cerca de 20 km da cidade de Chernobyl e a 4 km da cidade de Pripyat. Num raio de aproximadamente 30 km, haviam vilas e fazendas que cultivavam vários produtos como legumes e verduras, além da criação de milhares de cabeças de gado. Como reservatório de água, utilizavam o rio Pripyat com 4 km de extensão. Em 1970, iniciou-se a instalação da usina de Chernobyl e em 1983 foi entregue o reator 4, local onde aconteceu o acidente. A usina tinha um total de quatro reatores do tipo RBMK-1000 “(*Reaktor Bolshoy Moshchnosti Kanalnyy* - reator de canaletas de alta potência)”, refrigerados a água em circuito múltiplo de refrigeração forçada e como moderador de nêutrons o grafite (CASTILHO; SUGUIMOTO, 2014). Contavam também com canais verticais contendo o combustível e o refrigerante permitindo recarregamento localizado, combustível constituído por feixes de elementos cilíndricos em óxido de urânio, revestidos por tubo de zircônio e alimentação em vapor diretamente da turbina.

Na época, mais duas instalações ainda estavam em sua fase de construção, completando um total de 6 reatores na usina. Cada reator da usina era capaz de gerar cerca de 1000 MW de energia elétrica. No entanto, na unidade 4, ainda haviam

testes de segurança a serem concluídos sobre a capacidade de refrigeração na falta de energia, solicitados pelo Comitê Estatal para Uso da Energia Atômica (CASTILHO; SUGUIMOTO, 2014).

As usinas nucleares geram energia elétrica, mas consomem uma parte dela para acionar as bombas responsáveis pela circulação do refrigerante que passa pelo núcleo e sistemas auxiliares.

O objetivo dos testes era investigar quanto tempo o turbo alternador continuaria gerando eletricidade após interromper a alimentação de vapor que acionava as bombas de refrigeração no caso de um colapso, e ainda, se as turbinas girando por inércia tinham a capacidade de fornecer um pouco mais de potência para manter as bombas em funcionamento nestas circunstâncias, até que as bombas movidas a diesel fossem ligadas (SILVA, 1986).

O ideal para a realização de tal procedimento seria o desligamento completo do reator, pois o mesmo tinha que ser operado por controles manuais. Porém, desligado o reator, os operadores tinham consciência de que levaria dias para religá-lo, devido ao fenômeno de envenenamento por Xenônio-135 (veneno altamente absorvedor de nêutrons) como explicado no capítulo anterior, sendo um dos parâmetros que contribuiu nas causas do acidente. Além disso, deficiências no projeto, coeficiente de vazio positivo (este coeficiente é o quão rápido a reatividade pode mudar conforme há bolhas ou vazios transientes no reator), barras de controle com grafite nas pontas, que demoravam em média 20 segundos para sua queda, enquanto que o normal seria de aproximadamente 2 segundos, violação de várias normas de segurança e procedimentos de ensaio, contribuíram significativamente para o acidente.

3.2 Visão técnica do acidente

As informações abaixo foram baseadas no relatório técnico do Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN) de Silva (1986), com a complementação de informações do artigo intitulado Chernobyl - a catástrofe de Suguimoto e Castilho (2014) e do site da Agência internacional de energia atômica (INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY, 2006). O conteúdo do documento da CNEN baseou-se em dados computacionais, depoimentos, registros e resultados de avaliações simuladas através do programa de cálculo ajustado para tal evento.

3.2.1 Sequência de eventos

25/04/1986

Neste dia, estava marcada a manutenção de rotina no reator 4 da usina, aproveitando-se do momento para a realização dos testes de segurança, até então programados para a 1h da madrugada. Nesta ocasião, a potência foi reduzida

de 3200 MWt para 1600 MWt. Às 14 h, aconteceu o desligamento do sistema de resfriamento de emergência que evitava seu funcionamento durante os testes, sendo crucial para a cadeia de erros até o acidente. Porém, devido a uma demanda de energia, o teste foi adiado para mais tarde e o reator continuou trabalhando com a metade da potência. Mais tarde, por volta de 23 h, prosseguiu-se a redução da potência, que de acordo com o programa de ensaio, deveria estar entre 700 MWt e 1000 MWt. Às 00 : 00 h, houve a troca de funcionários para o turno da noite.

26/04/1986

00 h : 05 min - Marcava no sistema uma potência de 720 MWt que continuava caindo, certamente causado pelo envenenamento no núcleo. Quando o reator está trabalhando com a energia máxima, boa parte do Xenônio-135 é consumido, mas por causa do atraso de quase 10 h funcionando com a metade da potência, o veneno não foi totalmente queimado o que resultou em seu acúmulo, contaminando o núcleo. Anteriormente, na Figura 4, mostrou-se que a maior concentração de Xenônio-135, ou seja, o pico do veneno se dá por volta de 10 h após o *shutdown* e, em seguida, decresce por conta de seu decaimento.

00 h : 28 min - A potência do reator cai para somente 30 MWt. Erro do operador que passou o reator do sistema automático de controle local (SACL) para o sistema automático de controle (SAC), que de acordo com procedimentos operacionais só é permitido para baixos níveis de potência. Com 30 MWt, o Xenônio-135 continuava sendo formado a partir do decaimento do Iodo-135, deixando o reator repleto de veneno. Neste instante, o sistema dispara um aviso para desligar o reator e ligá-lo após 24 h, aumentando lentamente a potência nesse período. Porém, tal aviso é ignorado. Então começou-se a retirada de dezenas de barras de controle de uma vez, pois necessitava-se de no mínimo 700 MWt para a realização dos testes. Das 211 barras de controle existentes no reator, restaram somente 6 no núcleo.

01 h : 00 min - O operador consegue reconduzir o reator à potência de 200 MWt em regime estável. No entanto, os procedimentos do ensaio já tinham sido violados, pois a potência estava muito abaixo do recomendado, o que já tornava inválido os resultados, mesmo assim, os testes prosseguiram.

01 h : 07 min - Estavam ligadas as 8 bombas de água, pelo fato de que 4 delas seriam alimentadas por inércia do turboalternador e as outras 4 alimentadas por outros sistemas de suprimento para refrigerar o núcleo. Diante disso, houve um aumento da vazão de água no reator que ocasionou uma diminuição de vapor e da pressão nos separadores, tornando o reator sensível a variação dos parâmetros e tentativa de controle manual. Para evitar o desligamento do reator, os operadores bloquearam os dispositivos de "TRIP" referentes aos parâmetros.

01 h : 19 min - Para restabelecer o nível de água perdido, iniciou-se sucessivas

manobras de injeção de água nos separadores de vapor.

01 h : 19 min : 30 s - A taxa de água injetada excede a taxa de formação de vapor nos separadores. A taxa de descarga de água de alimentação atingiu valores 3 vezes superior ao valor de equilíbrio. As barras de controle automáticas deslocaram-se até o nível superior da placa do núcleo, com isso, água fria chegava no núcleo diminuindo ainda mais o vapor. As barras de controle manuais foram retiradas. A pressão nos separadores de vapor decresceu.

01 h : 19 min : 58 s - Para diminuir a taxa de queda de pressão de vapor, fechou-se a válvula principal de *bypass* de vapor para condensador.

01 h : 21 min : 50 s - Aumentou-se a vazão de descarga de água de alimentação para os separadores, excedendo-se em até 4 vezes o valor de equilíbrio. Iniciou-se então, uma diminuição da vazão de descarga de água de alimentação.

01 h : 22 min : 10 s - Começou-se a gerar vapor com a água mais quente entrando no núcleo. Com isso, as barras de controle automático começaram a descer, para compensar o coeficiente de reatividade positiva. Contudo a reatividade ainda continuava a diminuir lentamente.

01 h : 22 min : 30 s - Parou-se o decréscimo da taxa de descarga de água de alimentação, atingindo 1,5 vezes menor que o valor de equilíbrio. A margem de reatividade operacional permissível passava já de 50%. Contudo, os operadores não deixaram de prosseguir com os testes.

01 h : 22 min : 45 s - Interrompeu-se o processo de aumento de título de vapor no núcleo, estabilizando a vazão de água de alimentação e pressão de vapor nos separadores.

01 h : 23 min : 04 s - Iniciou-se o teste de inércia do turboalternador número 8, fechando as válvulas de parada de emergência do turboalternador (controlam o fluxo de vapor), sendo que o de número 7 já havia sido parado no dia anterior. A potência ainda estava em 200 MWt quando os operadores observaram "TRIP ALARM" nos dois turboalternadores o que não estava previsto no programa teste. Em seguida, bloqueou-se o sistema de proteção disponível após o fechamento das "STOP VALVES" dos 2 turboalternadores, com o intuito de permitir o recomeço de um novo teste em caso de resultados insatisfatórios na primeira tentativa. Com isso, mais uma vez, os protocolos de segurança foram quebrados, pois o programa de ensaio não previa o bloqueio do sistema de proteção do reator após o desligamento dos 2 turboalternadores. Imediatamente, a potência começou aos poucos a aumentar.

Devido a falta de água para refrigeração do núcleo, a temperatura aumentou rapidamente e o vapor começou a ser criado, formando bolhas que impediram a absorção dos nêutrons, gerando o processo em cadeia que tornou a formação de vapor incontrolável.

01 h : 23 min : 21 s - As barras de controle do sistema automático começam a descer.

01 h : 23 min : 31 s - Aumentou-se a reatividade total e a potência neutrônica. Neste momento, o sistema automático de controle não conseguiu compensar o incremento de reatividade provocada pelo aumento do título do vapor.

01 h : 23 min : 40 s - O botão AZ-5 foi acionado, fazendo a inserção no núcleo de todas as barras de controle. Porém, no começo da inserção, o operador notou que as barras não estavam movimentando-se sem saber em qual ponto de elevação (o calor no interior do reator era tão intenso que deformou as barras de combustível impedindo a passagem das barras de controle). Diante da situação, cortou-se a alimentação elétrica dos mecanismos de acionamento para que as barras pudessem descer apenas impulsionadas pela força da gravidade. Pelo fato das barras de controle, apesar de serem constituídas de boro, possuírem grafite na ponta, ao penetrarem no núcleo causaram aumento da potência e não redução como o esperado pelos operadores.

01 h : 23 min : 43 s - Alarmes foram acionados indicando alta potência e valores de período T muito pequenos (sistema de proteção de emergência tornou-se ineficiente). Ocorreu crise de transferência de calor com o crescimento da temperatura do combustível.

01 h : 23 min : 44 s - Ocorreu a primeira excursão de potência. Em 3 segundos a potência atingiu 530 MWt.

01 h : 23 min : 45 s - O combustível se fragmenta com o aumento abrupto do valor do título de vapor. Ocorreu ebulição nucleada do refrigerante água, inserindo reatividade positiva, elevando a potência. Devido as válvulas de não retorno terem sido fechadas por causa do aumento de pressão no núcleo, ocorreu drástica redução da vazão de fluido refrigerante.

01 h : 23 min : 46 s - A intensa geração de vapor fez com que a pressão de vapor nos separadores excedesse o nível considerado para acidente.

01 h : 23 min : 47 s - Romperam-se os canais de refrigeração, levando a um aumento na vazão de refrigerante. A pressão no núcleo aumentou, fazendo com que a vazão de água das bombas de circulação praticamente cessasse. Como as válvulas haviam sido fechadas, somente a ruptura de canais de combustíveis permitiu o restabelecimento parcial da vazão de água.

01 h : 23 min : 48 s - Explosão térmica.

O excesso de vapor fez com que todo o sistema começasse a vibrar, a força exercida no sistema era além do que o projeto podia suportar, a pressão acumulada fez com que um equipamento de 200 toneladas caísse sobre o sistema de refrigeração agravando ainda mais o problema. Ouve-se um primeiro estrondo, era o vapor destruindo o reator, uma explosão hidráulica fazendo com que a tampa de contenção que pesava 700 toneladas fosse levantada, que na sua queda destruiu boa parte do prédio (CASTILHO; SUGUIMOTO, 2014). Vale salientar que, embora o reator contasse com uma série de barreiras entre o núcleo do reator e o ambiente, não havia um vaso de contenção

adequado para suportar a explosão do núcleo.

Dentro do reator, o grafite nas pontas das barras de controle e o zircalói, presente no revestimento dos elementos combustíveis, quando entraram em contato com a água e o calor extremo produziram hidrogênio e monóxido de carbono, tornando-se altamente explosivos ao entrar em contato com o oxigênio. Após a explosão de vapor, o hidrogênio contido no reator inicia várias outras explosões. Tais explosões geraram cerca de 30 focos de incêndio que inicialmente foram combatidas pela equipe de bombeiros, mas pelo grafite presente em grandes quantidades e ainda superaquecido, tornou-se quase impossível o controle do incêndio pelos bombeiros no local.

O acidente liberou cerca de 50 toneladas de produtos radioativos provenientes da fissão, carregado em nuvens que praticamente viajaram toda Europa, chegando até a costa leste dos EUA. Por meio das chuvas e outros fatores climáticos, foram depositados produtos como o Césio-137 que tem sua meia-vida de 30 anos. As regiões que receberam as maiores taxas de contaminação foram a Ucrânia, país que abrigava o reator, a Rússia e a Bielorrússia, somando 145 mil quilômetros quadrados que não podem receber nenhum morador, lavoura ou animais (CASTILHO; SUGUIMOTO, 2014).

Com isso, foi necessário criar uma zona de exclusão num raio de 30 km dos locais que apresentavam alto risco para a vida humana. A cidade de Pripjat, até hoje é considerada uma cidade-fantasma, abandonada devido aos altos índices de radiação.

Em Silva (1986), afirma-se que o número total de casos fatais devidos a queimaduras e um caso de síndrome de irradiação aguda entre o pessoal da usina chegou a 28 no início de julho de 1986 e nenhum caso de síndrome de irradiação aguda ocorreu dentre membros da população. Lesões na pele e catarata relacionadas à radiação estão entre os principais problemas entre os sobreviventes. Além dos trabalhadores das equipes de emergência, centenas de milhares de pessoas foram envolvidas em operações de resgate, havendo um aumento aparente da ocorrência de leucemia e de catarata entre aqueles que receberam doses elevadas entre 1986 e 1987.

Após o acidente, construiu-se uma estrutura sobre o reator exposto com o propósito de conter o material radioativo. Recentemente, em 2016, foi construída outra estrutura metálica pelo governo ucraniano e projetada para funcionar até o final do século XXI. Foram também tomadas medidas para melhorar a segurança nuclear referentes a outras centrais equipadas com reatores RBMK, com objetivo de evitar a repetição de condições similares àquelas ocorridas em Chernobyl e, também, medidas advindas da análise científica e técnica do acidente que visaram melhorar a segurança de todos os tipos de usinas nucleares. Criou-se um Ministério Federal da Energia Nuclear, com objetivo de aumentar o nível de direção e responsabilidade pelo desenvolvimento da energia nuclear, melhorar a operação de centrais nucleares, instaurar um regime internacional para a segurança do desenvolvimento da nucleoeletricidade e expandir a cooperação internacional neste domínio (SILVA, 1986).

Em geral, as usinas nucleares contam com sistemas de segurança passivos, que entram automaticamente em ação para impedir acidentes e, também, desligar e resfriar o reator em situações de emergência. Em Chernobyl não era diferente, porém, esta apresentava um erro de projeto quando a autonomia dos sistemas de segurança automáticos podiam ser controlados. Assim, no reator 4, foram desligados manualmente pelos próprios operadores da usina, o que permitiu o avanço irregular de procedimentos operacionais durante o teste. As usinas atualmente contam ainda com duas barreiras protetoras tanto na parte externa, de concreto, e outra interna, de aço. Essas paredes de contenção protegem as usinas contra terremotos, maremotos, inundações e explosões, e também o aumento de pressão no seu interior.

O acidente em Chernobyl aconteceu devido a inúmeros erros, como tomadas de decisões precipitadas e deficiências de projeto, que permitiram com que o reator ficasse instável e sem controle. Iniciou-se pelo desligamento do sistema de refrigeração no dia anterior ao acidente, deixando-o em funcionamento apenas com metade da potência por quase 10 h, o que levou ao envenenamento por Xenônio-135 no núcleo e a queda de potência para apenas 30 MWt, prejudicando sua retomada. Após isso, foram tomadas medidas irregulares e quebras de protocolos de segurança para tentar reconduzir a potência do reator contaminado, com o intuito de finalizar o teste. Porém, problemas físicos muitos mais complexos, abrangendo conceitos termo-hidráulicos, contribuíram para a instabilidade do reator, levando a um aumento abrupto de pressão e reatividade, ocasionando a explosão térmica.

4 METODOLOGIA DE SOLUÇÃO DOS MODELOS VIA MÉTODO DE ROSENBROCK

Nesta dissertação, é feita uma abordagem numérica nos modelos com os efeitos dos venenos no reator nuclear, negligenciados pelos operadores de Chernobyl, com o objetivo de analisar a influência dessa reatividade negativa na contabilização final da densidade e, conseqüentemente, na potência do reator nuclear. Contudo, neste trabalho, desconsidera-se a complexidade dos efeitos termo-hidráulicos do sistema.

A fim de verificar a metodologia, resolve-se, primeiramente, o modelo tradicional da Cinética Pontual para um e seis grupos de precursores, considerando reatividades do tipo: constante, rampa, quadrático, zig-zag, senoidal e fonte pulsada. Após, resolve-se as Equações da Cinética Pontual de Nêutrons para inserção de reatividade constante e do tipo rampa para seis grupos de precursores com efeitos de temperatura. Por fim, ainda para verificação da metodologia, resolve-se o modelo com os efeitos dos venenos absorvedores de nêutrons para inserção de reatividade constante, considerando um grupo de precursores de nêutrons atrasados. Após verificação da metodologia, apresenta-se a simulação do acidente em Chernobyl, onde resolve-se o modelo com os efeitos de temperatura e também com os efeitos dos principais venenos absorvedores de nêutrons, trazendo o contexto do acidente em Chernobyl.

Em razão dos modelos propostos possuírem característica de rigidez, devido à grande diferença entre os tempos de vida dos nêutrons prontos e atrasados, buscou-se na literatura métodos numéricos para sua solução. O método de Rosenbrock tem-se mostrado satisfatório na solução de problemas envolvendo sistema de equações diferenciais ordinárias do tipo rígidas, destacando-se para os trabalhos de Galina (2016) e Sehnem (2018). Portanto, o método de Rosenbrock tornou-se a escolha para a solução dos modelos propostos neste trabalho.

4.1 Método de Rosenbrock

Os métodos de Rosenbrock pertencem a uma das classes dos métodos Runge-Kutta, consistem em linearizar os métodos de Runge-Kutta implícitos, facilitando

assim a implementação do código, uma vez que ao invés de resolver sistemas não lineares, resolve-se uma sequência de sistemas lineares. O método Rosenbrock é dito L-estável que, por sua vez, requer que o método seja implícito. Métodos Runge-Kutta implícitos ou semi-implícitos são conhecidos por satisfazer condições para boa estabilidade (BUTCHER, 1964). Os métodos surgiram em torno 1963, onde Rosenbrock propôs uma solução numérica para equações rígidas. Trata-se de uma nova forma de resolução das equações implícitas e não lineares, que antes eram solucionadas com processos iterativos que, em geral, levam a problemas de convergência. São métodos de passo simples que permitem a variação de tamanho do passo de integração trocando a parte iterativa do método de Euler pela matriz jacobiana diretamente na fórmula de integração.

Para o desenvolvimento do método, utiliza-se a forma autônoma para sistemas de equações diferenciais ordinárias,

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad (44)$$

com $y = y(t) \in \mathbb{R}^m$, $t \in \mathbb{R}$ e $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$. A escolha pela forma autônoma garante facilidade na manipulação das equações com notações não tão complexas. Entretanto, a forma autônoma não modifica a estrutura do método, pois caso o sistema seja não autônomo, pode-se transformá-lo na forma da Equação (44) simplesmente acrescentando ao sistema a equação $t' = 1$, tratando a variável temporal t como uma variável dependente.

4.2 Desenvolvimento do método

O desenvolvimento de um método de Rosenbrock inicia com um estudo de como deve-se aplicar métodos de passo único implícitos com o objetivo de resolver problemas não lineares. Soluciona-se a parte implícita por meio de processos iterativos, neste caso, usa-se Newton-Raphson.

O método de Newton-Raphson é um dos métodos numéricos mais poderosos para resolver o problema de se encontrar as raízes de uma função. Um meio de se introduzir o método baseia-se nos polinômios de Taylor. Para resolver um problema envolvendo um sistema de equações diferenciais ($F(x) = 0$) ao expandir a função em torno de x^* por sua série de Taylor, considerando somente a primeira derivada, obtém-se:

$$F(x) \approx F(x^*) + (x - x^*)F'(x^*). \quad (45)$$

Assim, precisa-se calcular a jacobiana de $F(x)$, definida como:

$$J_F = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_1}{\partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial f_m}{\partial x_m} \end{bmatrix}. \quad (46)$$

Reescreve-se a expansão na Equação (45) como:

$$F(x) \approx F(x^*) + (x - x^*)J_F(x^*). \quad (47)$$

O processo iterativo de Newton-Raphson aplicado em um sistema de equações algébricas $F(y) = 0$, $F : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, é dado por:

$$y_{n+1} = y_n - J_F^{-1}(y_n)F(y_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (48)$$

Considera-se o método de Euler Implícito aplicado ao problema descrito na Equação (44) para mostrar a ideia do desenvolvimento do método de Rosenbrock. Logo, tem-se que

$$y_{n+1} = y_n + hf(y_{n+1}), \quad y(t_0) = y_0, \quad (49)$$

em que o tamanho do passo é $h = t_{n+1} - t_n$ e y_n , uma aproximação para $y(t_n)$. Cada passo do método corresponde a encontrar o zero de F , $F : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m$, definida como

$$F(y) = y - y_n - hf(y). \quad (50)$$

Aplica-se o método de Newton no problema de Euler implícito descrito na Equação (49). Considerando I a matriz identidade $m \times m$, tem-se $J_F(y_n) = I - hJ_f(y_n)$ com $J_f = \partial f(y_n)/\partial y$ e $F(y_n) = -hf(y_n)$. Substituindo essas expressões em (48), obtém-se a equação

$$y_{n+1} = y_n - [I - hJ_f(y_n)]^{-1}(-hf(y_n)). \quad (51)$$

Define-se o vetor $k = y_{n+1} - y_n$. Multiplicando em ambos os lados da Equação (51) por $[I - hJ_f(y_n)]$ e dividindo por h , obtém-se

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{h}I - J_f(y_n) \end{bmatrix} k = f(y_n), \quad (52)$$

$$y_{n+1} = y_n + k.$$

Nota-se que a solução numérica da Equação (52) é obtida resolvendo-se um sistema de equações lineares a cada passo do intervalo de integração, evitando a resolução de equações não lineares. Além disso, evita-se o cálculo de uma matriz inversa, reduzindo os custos computacionais. Essa mesma abordagem foi adotada por Rosenbrock (1963) para métodos com mais estágios. A ideia de Rosenbrock consiste

em linearizar um método Runge-Kutta diagonalmente implícito, pois este possui uma fórmula que permite desenvolver métodos de muitos estágios e de ordem elevada. O processo é equivalente a aplicar uma iteração de Newton e não continuar usando o processo iterativo até a convergência. Apresenta-se a seguir a definição geral dos métodos Runge-Kutta explícitos e implícitos (BUTCHER, 1964)(LAMBERT, 1991).

Definição 1 Um método de Runge-Kutta (R-K) de S -estágios aplicado ao problema (44) é dado por:

$$\begin{aligned} k_i &= hf \left(y_n + \sum_{j=1}^S a_{ij} k_j \right), \quad i = 1, \dots, S \\ y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^S b_i k_i. \end{aligned} \quad (53)$$

Se $a_{ij} = 0$ quando $i \geq j$ tem-se um método R-K explícito. Se $a_{ij} = 0$ para $i > j$ e pelo menos um elemento $a_{ij} \neq 0$, tem-se um método R-K diagonalmente implícito (DIRK). Além disso, se todos os elementos da diagonal ($a_{ii}, i = 1, \dots, S$) são iguais, denomina-se método R-K isoladamente diagonal implícito (SDIRK). Nos outros casos tem-se um método implícito (IRK). Os métodos de Rosenbrock originaram-se usando como base os métodos de Runge-Kutta diagonalmente implícitos, devido a questões de estabilidade abordadas no decorrer do trabalho.

Definição 2 Um método Runge-Kutta diagonalmente implícito de S -estágios aplicado ao sistema (44) é dado por:

$$\begin{aligned} k_i &= hf \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j + a_{ij} k_i \right), \quad i = 1, \dots, S \\ y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^S b_i k_i. \end{aligned} \quad (54)$$

Expandem-se f na Equação (54) em série de Taylor até o primeiro termo, em torno de

$$g_i = y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j,$$

e obtém-se a equação linearizada:

$$k_i = hf(g_i) + hJ_f(g_i)a_{ii}k_i. \quad (55)$$

Observa-se que a Equação (55) pode ser interpretada como aplicação de uma iteração de Newton a cada estágio de (54). Repete-se o processo construído em (48)

para o método de Runge-Kutta diagonalmente implícito, considerando que o problema a ser resolvido é $F(k_i) = 0$, em que

$$F(k_i) = k_i - hf(g_i + a_{ii}k_i), \quad (56)$$

com $k_i \in \mathbb{R}^m$ e as condições iniciais do problema $k_i^{[0]} = 0$.

Aplicando uma iteração de Newton para a Equação (56), fica-se com

$$k_i^{[1]} = k_i^{[0]} - J_F^{-1}(k_i^{[0]})F(k_i^{[0]}). \quad (57)$$

Substituindo-se os valores $J_F(k_i^{[0]})$ por $(I - ha_{ii}J_f(g_i))$ e $F(k_i^{[0]})$ por $(-hf(g_i))$ em (57), e usando a condição inicial, tem-se

$$k_i^{[1]} = -[I - ha_{ii}J_f(g_i)]^{-1}(-hf(g_i)). \quad (58)$$

Multiplicando a esquerda de ambos os lados da Equação (58) por $(I - ha_{ii}J_f(g_i))$, obtém-se:

$$[I - ha_{ii}J_f(g_i)]k_i^{[1]} = hf(g_i). \quad (59)$$

O lado esquerdo da Equação (59) resulta em um produto de um vetor com a soma de duas matrizes, podendo ser expandido para obter a Equação (55), isto é:

$$\begin{aligned} k_i^{[1]} &= hf(g_i) + hJ_f(g_i)a_{ii}k_i^{[1]}, \\ g_i &= y_n + \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}k_j. \end{aligned} \quad (60)$$

Logo, nota-se que o desenvolvimento em série de Taylor até o primeiro termo equivale a aplicar uma iteração de Newton ao problema (54). Rosenbrock propôs uma nova classe de métodos ao substituir a matriz jacobiana calculada em $g_i = (J_f(g_i))$ por $J_f(y_n) = J$ em (60), em que o cálculo desses fatores é necessário somente uma vez. E, ainda as multiplicações Jk_j do lado direito de $k_i^{[1]}$, são substituídas por uma multiplicação com uma combinação linear dos k_j . Finalmente, abaixo segue a definição de um método de Rosenbrock de S -estágios.

Definição 3 Um método Rosenbrock de S -estágios aplicado ao sistema (44) é dado por

$$\begin{aligned} k_i &= hf \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij}k_j \right) + hJ \sum_{j=1}^i \Omega_{ij}k_j, \quad i = 1, \dots, S \\ y_{n+1} &= y_n + \sum_{i=1}^S b_i k_i. \end{aligned} \quad (61)$$

Quando $\Omega_{ij} = \Omega$ para $i = 1, \dots, S$, tem-se que todos os estágios k_i podem ser resolvidos usando a mesma fatoração-LU de $(I - h\Omega J)$, obtendo assim uma redução no tempo de solução do sistema e facilitando a implementação do método. Logo, tem-se

$$(I - h\Omega J)k_i = hf \left(y_n + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j \right) + hJ \sum_{j=1}^{i-1} \Omega_{ij} k_j, \quad i = 1, \dots, S$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^S b_i k_i,$$
(62)

em que os coeficientes Ω , b_i , α_{ij} , Ω_{ij} são números reais, h é o tamanho do passo de integração, $J = J_f(y_n)$ é a matriz jacobiana, I é a matriz identidade $m \times m$ e S o número de estágios. Os vetores k_i são calculados resolvendo um sistema de equações lineares de ordem m para diferentes estágios S do lado direito. Os coeficientes são determinados com o intuito de obter estabilidade e consistência para os problemas rígidos apresentados na seção seguinte.

4.3 Condições de ordem

Os métodos de Rosenbrock apresentados na equação (61) apresentam as seguintes características que os tornam valiosos em análise numérica:

- Custos computacionais reduzidos: Uso de apenas uma iteração de Newton por etapa de integração, podendo alcançar precisão e estabilidade;
- Pode ser considerado um método L-estável;
- Com menos custo computacional os estimadores de erros podem ser incorporados na fórmula do método.

A escolha dos coeficientes do método Rosenbrock de S -estágios são determinantes a medida que permitem obter a ordem de precisão da fórmula de integração e da sua estabilidade numérica.

Condições de ordem para os parâmetros livres podem ser determinadas por diferenciação ou aplicando a teoria da série de Butcher (KAPS; WANNER, 1981), caso tenha um método de alta ordem. Por exemplo, para aplicar o método de Rosenbrock de ordem 6 e 8 exige-se, respectivamente, um total de 37 e 200 equações de condições de ordem. Na abordagem por diferenciação, as condições de ordem para os parâmetros livres são determinadas comparando-se a série de Taylor da solução exata da equação teste com a série de Taylor do método numérico. Com isso, as condições para os parâmetros são definidas igualando-se os termos derivativos de ambas expansões de Taylor. A Tabela 3 mostra as condições de ordens dos parâmetros dos métodos

Rosenbrock até a ordem 4. Uma expansão desta tabela com condições de ordem 6 pode ser vista em Kaps (1981).

Tabela 3: Condições de ordem para as fórmulas de Rosenbrock.

Ordem	Condição de ordem
1	$\sum_i b_i = 1$
2	$\sum_i b_i \beta_i = \frac{1}{2} - \Omega$
3	$\sum_i b_i \alpha_i^2 = \frac{1}{3}$ $\sum_{i,j} b_i \beta_{ij} \beta_j = \frac{1}{6} - \Omega + \Omega^2$
4	$\sum_i b_i \alpha_i^3 = \frac{1}{4}$ $\sum_{i,w} b_i \alpha_i \alpha_{iw} \beta_w = \frac{1}{8} - \frac{1}{3} \Omega$ $\sum_{i,w} b_i \beta_{iw} \alpha_w^2 = \frac{1}{12} - \frac{1}{3} \Omega$ $\sum_{i,w,l} b_i \beta_{iw} \beta_{wl} \beta_l = \frac{1}{24} - \frac{1}{2} \Omega + \frac{3}{2} \Omega^2 - \Omega^3$

Fonte: Adaptada de Kaps (1979).

onde na Tabela 3 $i, j, w, l = 1, \dots, S$. Considera-se as seguintes abreviações: $\beta_{ij} = \alpha_{ij} + \Omega_{ij}$, $\alpha_i = \sum \alpha_{ij}$, $\beta_i = \sum \beta_{ij}$ e $\alpha_{ij} = \Omega_{ij} = 0$ para $i \leq j$.

4.4 Estabilidade

A estabilidade de um método de integração de passo único é analisada verificando-se o erro local ($\delta_h(t_n)$) e global (ϵ_n) de uma solução numérica quando comparada com sua solução exata ao longo do processo numérico. O erro local é o erro associado a cada etapa do processo, enquanto no erro global é considerado um erro acumulativo oriundo de erros somados (erros locais) durante a integração. A medida em que a integração avança, a estabilidade de um método de passo único é alcançada quando o erro global da solução não cresce sem limites, ou expressando matematicamente, quando a desigualdade de erro abaixo se mantém,

$$\|\epsilon_{n+1}\| \leq \|\epsilon_n\| + \|\delta_h(t_n)\|. \quad (63)$$

Para caracterizar e analisar a estabilidade de um método numérico, utiliza-se a

seguinte equação teste,

$$\frac{dy}{dt} = \omega y, \quad y(t_0) = y_0, \quad (64)$$

em que ω é uma constante pertencente ao conjunto dos complexos com parte real negativa. Usa-se essa equação teste pois sua solução analítica é conhecida, dada por

$$y(t) = y_0 e^{\omega t}. \quad (65)$$

O comportamento de um método numérico na solução do problema teste (64), pode ser extrapolado para prever seu comportamento na resolução de um equação não linear do tipo $y' = f(y)$ (GUPTA; MANOHAR; STEPHENSON, 1985), já que isso pode ser aproximado em um intervalo pequeno $[t_0, t_0 + h]$ por

$$y' = \frac{df}{dy}(y - y_0) + f(y_0). \quad (66)$$

Em geral, o termo $f(y_0)$ não afeta a estabilidade e, com isso, pode-se aproximar df/dy por ω . Considerando um sistema de equações, df/dy torna-se a matriz Jacobiana (J) e o sistema $y' = J(y - y_0) + f(y_0)$ é transformado em um conjunto de equações da forma $y' = \omega(y - y_0) + f(y_0)$, em que ω é um autovalor de J . Com isso, o problema teste pode ser usado para analisar a estabilidade de métodos numéricos, resolvendo o caso geral $y' = f(y)$.

A função de estabilidade da solução exata da equação teste é

$$R = \frac{y(t_{n+1})}{y(t_n)} = e^{h\omega}, \quad (67)$$

em que R representa a razão de soluções computadas em t_{n+1} e t_n .

Os valores de ω que tornam a solução exata da equação teste (64) estável, ou melhor, $R(\omega) < 0$, implica na função de estabilidade R da solução exata cumprir $|R(h\omega)| \leq 1$, tonando-se a condição de estabilidade para qual a solução de um método numérico não cresça exponencialmente.

Logo, a análise acima feita a partir de uma equação teste possibilita testar a estabilidade de vários métodos numéricos. Ressalta-se que métodos numéricos utilizados para a integração de equações diferenciais ordinárias (EDO's) rígidas, precisam ser estáveis em boa parte na região no semi-plano esquerdo, onde $h\omega$ possui parte real negativa, pois é onde se encontram todos os autovalores ω que tornam também a solução exata estável. Métodos ditos A-estáveis possuem região de estabilidade que compreende toda metade do plano esquerdo ($h\omega$), ou melhor, são estáveis para qualquer passo de tempo positivo (h) sempre que ω tem uma parte real negativa.

Segundo Dahlquist (1963), um método é chamado A-estável, se e somente se,

$|y_{n+1}/y_n| = c \leq 1$ quando o método é aplicado com qualquer passo h positivo na equação teste $y' = \omega y$, em que ω são autovalores complexos com parte real negativa.

Porém, métodos A-estáveis podem não ser suficientes quando se consideram sistemas de EDO's rígidos, podendo trazer problemas de estabilidade e precisão. Segundo Bui (1979), métodos A-estáveis não são controlados quando $h\omega \rightarrow -\infty$, gerando resultados insatisfatórios. Com isso, métodos considerados L-estáveis são necessários para obter eficiência da integração aplicados em sistemas de EDO's rígidos, evitando possíveis oscilações nas soluções.

Um método é definido L-estável se ele é A-estável e $y_{n+1}/y_n \rightarrow 0$ quando $h\omega \rightarrow -\infty$ (SCHOLZ, 1974). A partir disso, desenvolve-se uma função estabilidade ($R(h\omega) = y_{n+1}/y_n$) para os métodos Rosenbrock usadas para determinar os parâmetros livres que tornem as fórmulas do método L-estáveis.

O método de Rosenbrock aplicado a equação teste (64) resulta em uma função estabilidade com ordem $p \geq S$ e $z = h\omega$ definida em Kaps (1979) como:

$$R(z) = \frac{1}{(1 - \Omega z)^S} \sum_{K=0}^S L_K^{(S-K)} \left(\frac{1}{\Omega} \right) (-\Omega z)^K, \quad (68)$$

em que

$$L_K^m(x) = \sum_{i=0}^K (-1)^i \frac{(K+m)!}{(m+i)!(K-i)! i!} x^i \quad (69)$$

é o polinômio generalizado de Laguerre de grau K que produz um polinômio com coeficientes reais e uma variável x . E, tem-se $R(z)$ como sendo uma aproximação racional para e^z de ordem $p \geq S$.

A função de estabilidade dos métodos de Rosenbrock são regidas exclusivamente pelo parâmetro Ω , que é uma das raízes do polinômio de Laguerre de grau K . Portanto, as regiões de estabilidade das fórmulas dos métodos podem ser definidas como uma função de Ω , como mostra a Tabela 4, para fórmulas de Rosenbrock com $p = S$ (ordem = estágios), e com $p = S \leq 4$.

Tabela 4: Valores do parâmetro livre Ω para os quais A- e L-estabilidades são alcançados.

Ordem S	A-estabilidade	L-estabilidade
2	$1/4 \leq \Omega \leq +\infty$	$\Omega = (2 \pm \sqrt{2})/2$
3	$1/3 \leq \Omega \leq 1,068\ 579\ 02$	$\Omega = 0,435\ 866\ 52$
4	$0,394\ 337\ 57 \leq \Omega \leq 1,280\ 579\ 76$	$\Omega = 0,572\ 816\ 06$

Fonte: Adaptada de Hairer (1996).

Para o método de Rosenbrock, a condição de L-estabilidade é equivalente às duas

condições seguintes:

- $|y_{n+1}/y_n| \leq 1$ com $Re(h\lambda) = 0$;
- y_{n+1}/y_n tem numerador com grau menor que o denominador em $h\omega$.

Nesta pesquisa, utilizou-se o método de Rosenbrock de quarta ordem com quatro estágios, mostrado na seção seguinte com os valores dos parâmetros usados.

4.5 Implementação do método

Para calcular os vetores k_i em (62), um sistema linear de ordem $\mathcal{N}$ para quatro estágios do lado direito deve ser resolvido. Na literatura existem métodos Rosenbrock com estruturas e parâmetros diferentes. Usou-se uma estrutura adaptada do método encontrado em Yang, Jevremovic (2009), visto que este convergiu de forma mais rápida quando comparado com resultados existentes da literatura. Os parâmetros do método Rosenbrock seguem listados na tabela 5 e a estrutura do método segue descrito a seguir

$$\begin{aligned}
 Bk_1 &= f(y_0, t_0) + hc_1 \frac{\partial f(y_j, t_j)}{\partial t}, \\
 Bk_2 &= f(y_0 + a_{21}k_1, t_0 + h) + \left[hc_2 \frac{\partial f(y_j, t_j)}{\partial t} + \frac{c_{21}k_1}{h} \right], \\
 Bk_3 &= f(y_0 + a_{31}k_1 + a_{32}k_2, t_0 + h) + \left[hc_3 \frac{\partial f(y_j, t_j)}{\partial t} + \frac{c_{31}k_1 + c_{32}k_2}{h} \right], \\
 Bk_4 &= f(y_0 + a_{41}k_1 + a_{42}k_2, t_0 + h) + \left[hc_4 \frac{\partial f(y_j, t_j)}{\partial t} + \frac{c_{41}k_1 + c_{42}k_2 + c_{43}k_3}{h} \right], \\
 y(t_0 + h) &= y(t_0) + b_1k_1 + b_2k_2 + b_3k_3 + b_4k_4.
 \end{aligned} \tag{70}$$

em que $B = [(1/\Omega h)I - \partial f(y_j, t_j)/\partial y]$, em que I é a matriz identidade $m \times m$, h é o tamanho do passo de integração, Ω é uma das raízes do polinômio de Laguerre, $\partial f(y_j, t_j)/\partial y$ é a matriz jacobiana em $t_{j+1} = t_j + h$ e y_j é o problema avaliado em $t = t_j$ para cada j da malha.

De acordo com Yang, Jevremovic (2009) o erro de truncamento pode ser obtido a partir da fórmula,

$$err = \sum_{i=1}^4 e_i k_i, \tag{71}$$

E o erro máximo do vetor aproximação (y) é definido de acordo com Yang, Jevremovic (2009) a seguir,

$$err_{\max} = \max_{j=1, \dots, P} \left| \frac{err}{y_{\text{scale}}} \right|, \tag{72}$$

Tabela 5: Parâmetros para o método Rosenbrock de quarta ordem com quatro estágios.

Variável	Valor	Variável	Valor
Ω	0,5	α_{21}	2
α_{31}	1,92	α_{32}	0,24
c_{21}	-8	c_{31}	14,88
c_{32}	2,4	c_{41}	-0,896
c_{42}	-0,432	c_{43}	-0,4
b_1	19/9	b_2	0,5
b_3	25/108	b_4	125/108
c_1	0,5	c_2	-1,5
c_3	2,42	c_4	0,116
e_1	17/54	e_2	7/36
e_3	0	e_4	125/108

Fonte: Yang, Jevremovic (2009).

em que P é o número de passos a ser avaliado e y_{scale} é definido como

$$y_{scale} = |y(t_0)| + |hf(y_0, t_0)| + 10^{-30}. \quad (73)$$

O incremento 10^{-30} é adicionado para evitar divisão por zero na Equação (72).

5 RESULTADOS

Neste capítulo, apresentam-se os resultados numéricos, a fim de verificar a metodologia proposta. Os resultados são obtidos para um e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados e reatividades do tipo: constante, rampa, quadrático, zig-zag, senoidal e fonte pulsada. Comparam-se esses resultados com os métodos da Aproximação Polinomial (PAM) presente em Tumelero (2015), com o método da Aproximação constante por partes melhorado (EPCA) presente em Picca, Furfaro, Ganapol (2013) e com o método *Backward Euler Finite Diference* (BEFD) presente em Ganapol (2013).

Os resultados para a densidade de nêutrons para cada caso de reatividade são apresentados em tabelas e gráficos.

Neste trabalho, busca-se uma boa aproximação nos resultados com o intuito de verificar a metodologia e aplicá-la ao modelo da Cinética Pontual de Nêutrons, acoplando posteriormente os efeitos dos venenos e temperatura.

Os parâmetros cinéticos utilizados encontram-se na Tabela 6, Tabela 7 e Tabela 8. Considera-se a densidade de nêutrons inicial como $n_0 = 1 \text{ cm}^{-3}$ e a concentração de nêutrons atrasados $C_i(0) = \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0$ para $i = 1, 2, \dots, 6$. O software empregado para a implementação do algoritmo foi SciLab 6.0.2 (<http://www.scilab.org/>) em um computador com as seguintes configurações: Intel(R) Core(TM) i7-4930k CPU 3.40 GHz, 16GB de RAM, Sistema operacional de 64 bits, processador com base em x64.

Tabela 6: Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 2 \times 10^{-5} \text{s}$.

i	β_i	$\lambda_i(\text{s}^{-1})$
1	0,000266	0,0127
2	0,001491	0,0317
3	0,001316	0,115
4	0,002849	0,311
5	0,000896	1,40
6	0,000182	3,87
$\beta = 0,007$		

Tabela 7: Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 5 \times 10^{-4}\text{s}$.

i	β_i	$\lambda_i (\text{s}^{-1})$
1	0,000285	0,0127
2	0,0015975	0,0317
3	0,001410	0,115
4	0,0030525	0,311
5	0,00096	1,40
6	0,000195	3,87
$\beta = 0,0075$		

Tabela 8: Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 3 \times 10^{-5}\text{s}$.

i	β_i	$\lambda_i (\text{s}^{-1})$
1	0,000214	0,0124
2	0,001423	0,0305
3	0,001247	0,111
4	0,002568	0,301
5	0,000748	1,14
6	0,000273	3,01
$\beta = 0,006473$		

Tabela 9: Parâmetros cinéticos para um reator térmico com $\Lambda = 5 \times 10^{-5}\text{s}$.

i	β_i	$\lambda_i (\text{s}^{-1})$
1	0,00021	0,0124
2	0,00141	0,0305
3	0,00127	0,111
4	0,00255	0,301
5	0,00074	1,13
6	0,00027	3,00
$\beta = 0,00645$		

5.1 Inserção de Reatividade Constante

Resolvem-se as equações da Cinética Pontual de Nêutrons para reatividade constante usando os parâmetros cinéticos apresentados na Tabela 7 pelo método de Rosenbrock. Consideram-se quatro valores constantes de reatividade, dois deles subcríticos ($\rho = -1\beta$ e $\rho = -0,5\beta$) e outros dois supercríticos (subprontocrítico: $\rho = 0,5\beta$ e prontocrítico: $\rho = 1\beta$). Para este primeiro caso, comparam-se os resultados com o método *Backward Euler Finite Difference* (BEFD) presente em Ganapol (2013). Os resultados para a densidade de nêutrons em cm^{-3} estão presentes na Tabela 10 e os desvios relativos na Tabela 11 com o passo de tempo fixo de $\Delta t = 0,0001\text{s}$. A Figura 6 mostra o gráfico do comportamento da densidade de nêutrons para o caso de reatividade constante $\rho = -1\beta$, na Figura 7 para o caso $\rho = -0,5\beta$, na Figura 8 para reatividade constante $\rho = 0,5\beta$ e, por fim, mostra-se na Figura 9 o comportamento da densidade para o caso $\rho = 1\beta$.

Analisando-se as tabelas e gráficos, percebe-se uma boa precisão do método de Rosenbrock quando comparado ao método BEFD. No subcaso da reatividade subcrítica, $\rho = -1\beta$, o maior desvio relativo ocorre em $t = 100\text{s}$, cerca de $3,4882533565 \times 10^{-9}$, em outras palavras, alcança uma aproximação de 9 casas decimais após a vírgula. Para o subcaso subcrítico, $\rho = -0,5\beta$, o maior desvio relativo ocorre em $t = 0,1\text{s}$, com $4,2923046559 \times 10^{-10}$ e uma precisão de 9 casas decimais. Para a reatividade subpronto-crítica, $\rho = 0,5\beta$, o maior desvio relativo ocorre em $t = 1\text{s}$ com um valor de $1,990846651 \times 10^{-10}$ e uma precisão de 8 casas decimais. E, por fim, o maior desvio relativo para o caso pronto-crítico, $\rho = 1\beta$, acontece em $t = 100\text{s}$ com um desvio de $3,8513620727 \times 10^{-7}$ e uma precisão de 8 casas decimais.

Tabela 10: Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade constante.

Reatividade	$t(\text{s})$	ROS $\Delta t = 0,0001\text{s}$	BEFD
$\rho = -1\beta$	0,1	0,5205642859	0,5205642866
	1	0,4333334453	0,4333334453
	10	0,2361106508	0,2361106508
	100	0,0286676425	0,0286676425
$\rho = -0,5\beta$	0,1	0,6989252253	0,6989252256
	1	0,6070535656	0,6070535656
	10	0,3960776907	0,3960776907
	100	0,0715828544	0,0715828544
$\rho = 0,5\beta$	0,1	1,533112646	1,533112646
	1	2,5114942915	2,511494291
	10	14,215025242	14,21502524
	100	80061435,624	80061435,62
$\rho = 1\beta$	0,1	2,5157661414	2,515766141
	1	32,183540946	32,18354095
	10	3246978898	3246978898
	100	$2,596485E + 89$	$2,596484E + 89$

Tabela 11: Desvios Relativos para inserção de reatividade constante com $\Delta t = 0,0001\text{s}$.

Reatividade	$t(\text{s})$	Desvio Relativo
$\rho = -1\beta$	0,1	$1,34469462853 \times 10^{-9}$
	1	0,000000000
	10	0,000000000
	100	$1,74412667826 \times 10^{-9}$
$\rho = -0,5\beta$	0,1	$4,2923046559 \times 10^{-10}$
	1	0,000000000
	10	0,000000000
	100	$4,2563048551 \times 10^{-11}$
$\rho = 0,5\beta$	0,1	0,000000000
	1	$1,990846651 \times 10^{-10}$
	10	$1,406961975 \times 10^{-10}$
	100	$4,996163220 \times 10^{-11}$
$\rho = 1\beta$	0,1	$1,589972905 \times 10^{-10}$
	1	$1,2428713192 \times 10^{-10}$
	10	0,000000000
	100	$3,8513620727 \times 10^{-7}$

5.2 Inserção de Reatividade dependente do tempo

5.2.1 Inserção de Reatividade Rampa

Para o segundo caso de reatividade a ser analisada, utilizam-se os parâmetros cinéticos apresentados na Tabela 6, considerando uma inserção de reatividade linear $\rho(t) = at$, em que $a = 0,1\%$. Utilizaram-se dois passos de tempo $\Delta t = 0,0001s$ e $\Delta t = 0,00001s$, comparando-se os resultados obtidos para a densidade de nêutrons em cm^{-3} com o método BEFD, mostrados na Tabela 12 até 11 s e Figura 10 gerada no intervalo de 0 s a 8 s.

Analisando as tabelas e gráficos da reatividade rampa, percebe-se que há concordância com os resultados do método BEFD. Na Tabela 12, verifica-se que a medida que se reduz o passo de tempo, a convergência é alcançada, obtendo-se resultados mais precisos quando comparados com os dados *benchmark* da literatura. Na Tabela 13, encontram-se os desvios relativos para este caso, com $\Delta t = 0,00001s$, possuindo o maior desvio relativo em $t = 11s$, e um valor de $2,04993979 \times 10^{-4}$.

Tabela 12: Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade rampa.

Reatividade	$t(s)$	ROS	ROS	BEFD
		$\Delta t = 0,0001s$	$\Delta t = 0,00001s$	
$\rho = 0,1\beta t$	2	1,3382136087	1,3382014099	1,338200050
	4	2,2284808046	2,2284457943	2,228441897
	6	5,582286602	5,5820357692	5,582052449
	8	42,790022391	42,786668501	42,78629573
	10	451457,69528	451193,02182	451163,6239
	11	$1,795892E + 16$	$1,792581E + 16$	$1,792213607E + 16$

Tabela 13: Desvios Relativos para inserção de reatividade rampa com $\Delta t = 0,00001s$.

Reatividade	$t(s)$	Desvio Relativo
$\rho = 0,1\beta t$	2	$1,0162157743 \times 10^{-6}$
	4	$1,2037244514 \times 10^{-6}$
	6	$2,98811237486 \times 10^{-6}$
	8	$8,7123924527 \times 10^{-6}$
	10	$6,5120217807 \times 10^{-5}$
	11	$2,04993979 \times 10^{-4}$

5.2.2 Inserção de Reatividade Quadrática

Para o caso da reatividade quadrática, utilizam-se os parâmetros cinéticos da Tabela 7 com $\Lambda = 1 \times 10^{-4} s$ e reatividade definida como:

$$\rho(t) = at + bt^2, \quad (74)$$

em que a e b são constantes arbitrárias. Para verificar a metodologia deste caso, utiliza-se os mesmos coeficientes a e b encontrados em Petersen (2008). Para análise, fixa-se o parâmetro b e varia-se apenas o a , considerando três valores para a : $-b/10$, 0 e $b/10$. O comportamento da densidade de nêutrons em cm^{-3} até $t = 1,2\text{s}$ para esses três casos é apresentado na Figura 11. Não foram encontrados dados numéricos para este tipo de reatividade, com isso, apresenta-se somente o gráfico. O gráfico para os três casos obteve um comportamento esperado ao comparar com a literatura.

5.2.3 Inserção de Reatividade Senoidal

Para inserção periódica de reatividade, $\rho(t) = \rho_0 \text{sen}(t)$, com $\rho_0 = 0,00073$, resolve-se as ECPN usando os parâmetros cinéticos da Tabela 8, considerando seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. A densidade de nêutrons em cm^{-3} até 10s , com passo de tempo $\Delta t = 0,0001\text{s}$ e $\Delta t = 0,00001\text{s}$, é apresentada na Tabela 14, onde compara-se com o método Aproximação Polinomial (PAM) de Tumelero (2015). Na Tabela 14, mostram-se os desvios relativos para o caso senoidal e seu gráfico na Figura 13, gerado até 10s .

Analisando-se as tabelas e gráfico, pode-se perceber que o método Rosenbrock produz resultados satisfatórios quando comparado com o método da Aproximação Polinomial (PAM). Como pode ser visto na Tabela 15, o maior desvio relativo é $6,44960321971 \times 10^{-7}$ em $t = 3\text{s}$. Na Tabela 14, nota-se também a convergência do método Rosenbrock quando compara-se com os resultados da literatura (PAM), visto que, ao diminuir o passo de tempo, o erro relativo também diminui.

Tabela 14: Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade senoidal com seis grupos de precursores de nêutrons atrasados.

Reatividade	$t(\text{s})$	ROS	ROS	PAM
		$\Delta t = 0,0001\text{s}$	$\Delta t = 0,00001\text{s}$	$\Delta t = 0,0001\text{s}$
$\rho = 0,00073 \text{sen}(t)$	1	1,1239352929	1,123941089	1,123940509
	2	1,1688911711	1,168889413	1,168888959
	3	1,0744909323	1,074484010	1,074484703
	4	0,9538336925	0,953829729	0,953829290
	5	0,9073533104	0,907353473	0,907353490
	6	0,961534792	0,961539100	0,961539576
	7	1,0874527064	1,087458291	1,087458911
	8	1,171670565	1,171671201	1,171671274
	9	1,1113100446	1,111304995	1,111304437
	10	0,9846856831	0,984680857	0,984680323

Tabela 15: Desvios Relativos para inserção de reatividade senoidal com $\Delta t = 0,00001s$.

Reatividade	$t(s)$	Desvio Relativo
$\rho = 0,00073 \text{ sen}(t)$	1	$5,1604154788 \times 10^{-7}$
	2	$3,8840301852 \times 10^{-7}$
	3	$6,44960321971 \times 10^{-7}$
	4	$4,6025007263 \times 10^{-7}$
	5	$1,87358071439 \times 10^{-8}$
	6	$4,95039426229 \times 10^{-7}$
	7	$5,71056058963 \times 10^{-7}$
	8	$6,23041646747 \times 10^{-8}$
	9	$5,0211263576 \times 10^{-7}$
	10	$5,4230798313 \times 10^{-7}$

5.2.4 Inserção de Reatividade zig-zag

Para este caso, resolvem-se as ECPN com reatividade do tipo zig-zag definida como:

$$\rho(t) = \begin{cases} 0,0075t, & 0 \leq t \leq 0,5, \\ -0,0075(t - 0,5) + 0,00375, & 0,5 \leq t \leq 1, \\ 0,0075(t - 1), & 1 \leq t \leq 1,5, \\ 0,00375, & t \geq 1,5. \end{cases} \quad (75)$$

São utilizados os parâmetros descritos na Tabela 7, e com passo de tempo de $\Delta t = 0,0001s$ e $\Delta t = 0,00001s$. Comparam-se os resultados com os métodos da Aproximação Polinomial (PAM) presente em Tumelero (2015) e com o método *Enhanced Piecewise Constant Approximation* (EPCA) presente em Picca, Furfaro, Ganapol (2013). Os resultados numéricos para a densidade de nêutrons em cm^{-3} até 10s encontram-se na Tabela 16 e o gráfico do comportamento da densidade até 2s na Figura 12. Para cálculo dos desvios relativos, utilizou-se os dados numéricos do método EPCA e ROS com $\Delta t = 0,00001s$, onde mostram-se os valores na Tabela 17. Ao observar as tabelas e gráfico deste caso, nota-se que os resultados encontrados aproximam-se com os métodos PAM e EPCA enquanto se reduz o passo de integração, obtendo o maior desvio relativo de $7,69677438301 \times 10^{-6}$ em $t = 0,5s$.

Tabela 16: Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade zig-zag.

$t(s)$	ROS $\Delta t = 0,0001s$	ROS $\Delta t = 0,00001s$	PAM $\Delta t = 0,0001s$	EPCA
0,5	1,7212899131	1,7214091726	1,721422393	1,721422422
1	1,211194194	1,2111340908	1,211127399	1,211127415
1,5	1,8920831062	1,8922118385	1,892226104	1,892226140
2	2,5215662131	2,5216043656	2,521600526	2,521600530
10	12,047004216	12,047116659	12,04710533	12,04710535

Tabela 17: Desvios Relativos para inserção de reatividade zig-zag com $\Delta t = 0,00001s$.

$t(s)$	Desvio Relativo $\frac{ ROS-EPCA }{EPCA}$
0,5	$7,69677438301 \times 10^{-6}$
1	$5,5120542374 \times 10^{-6}$
1,5	$7,55802897850 \times 10^{-6}$
2	$1,5210973960 \times 10^{-6}$
10	$9,3873172612 \times 10^{-7}$

5.2.5 Inserção de Reatividade Fonte Pulsada

Para o caso de reatividade do tipo fonte pulsada, considera-se um grupo de precursores de nêutrons atrasados em um reator térmico com $\beta = 0,006502$, $\lambda = 0,077 s^{-1}$, $\Lambda = 5 \times 10^{-4} s$ e a reatividade definida por:

$$\rho(t) = \begin{cases} 4\beta \exp(-2t^2), & t < 1s, \\ 0, & t > 1s. \end{cases} \quad (76)$$

Usa-se para o método ROS os passos de tempo de $\Delta t = 0,0001s$ e $\Delta t = 0,00001s$. Na Figura 14 e Tabela 18 mostram-se os resultados obtidos para a densidade de nêutrons em cm^{-3} até 3s comparados com os métodos PAM e BEFD e na Tabela 19, apresentam-se os desvios relativos quando comparados os resultados com os do método BEFD. Conforme os gráficos e tabelas, nota-se que o método de Rosenbrock aproxima-se bem dos resultados comparados. Porém, observa-se que tanto o método proposto neste trabalho quanto o método PAM atingem maiores discrepâncias neste caso de reatividade ao comparar com o método BEFD, considerado *benchmark* (resultados padrões) na literatura. Analisando-se a Tabela 19, verifica-se que o maior desvio relativo é de $2,030486431 \times 10^{-4}$ em $t = 0,8s$ e todos os outros valores dos desvios relativos ficam nessa ordem de aproximação.

Tabela 18: Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade fonte pulsada.

$t(s)$	ROS $\Delta t = 0,0001s$	ROS $\Delta t = 0,00001s$	PAM $\Delta t = 0,0001s$	BEFD
0,5	9369944,7406	9379086,787	9380592,423	9380044,272
0,8	169116284,16	169443203,99	169487791,0	169477616,1
1	107261206,3	107495133,74	107519618,5	107513170,4
2	4824400,113	4833134,9073	4834396,081	4834106,369
3	4824186,5874	4832920,8993	4834182,039	4833892,339

Tabela 19: Desvios Relativos para inserção de reatividade fonte pulsada com $\Delta t = 0,00001s$.

$t(s)$	Desvio Relativo
0,5	$1,020768103 \times 10^{-4}$
0,8	$2,030486431 \times 10^{-4}$
1	$1,677627023 \times 10^{-4}$
2	$2,009599967 \times 10^{-4}$
3	$2,009642813 \times 10^{-4}$

Figura 6: Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = -1\beta$.

Figura 7: Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = -0,5\beta$.

Figura 8: Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = 0,5\beta$.

Figura 9: Densidade de nêutrons para reatividade constante com $\rho = 1\beta$.

Figura 10: Densidade de nêutrons para reatividade rampa de 0 a 8 segundos.

Figura 11: Densidade de nêutrons para reatividade quadrática $\rho(t) = at + bt^2$.

Figura 12: Densidade de nêutrons para reatividade zig-zag de 0 a 2 segundos.

Figura 13: Densidade de nêutrons para reatividade senoidal $\rho(t) = 0,00073 \sin(t)$.

Figura 14: Densidade de nêutrons para reatividade fonte pulsada.

5.3 Inserção de Reatividade Constante com Realimentação de Temperatura

Neste seção, resolvem-se as equações da Cinética Pontual de Nêutrons considerando os efeitos de realimentação de temperatura e três valores de reatividades: $\rho = 1\beta$, $\rho = 1,5\beta$ e $\rho = 2\beta$. Consideram-se seis grupos de precursores de nêutrons atrasados com os parâmetros cinéticos descritos na Tabela 9. Admite-se a densidade inicial de nêutrons 1 cm^{-3} , temperatura inicial $T_0 = 300 \text{ K}$, constante de proporcionalidade entre temperatura e densidade de nêutrons $H = 2,5 \times 10^{-6} \frac{\text{K}}{\text{MWs}}$ e coeficiente de temperatura da reatividade $\alpha = 1 \text{ K}^{-1}$. Comparam-se os resultados encontrados para a densidade de nêutrons em cm^{-3} até 100 s com o método *Backward Euler Finite Difference* (BEFD) presente em Ganapol (2013) e o método da Aproximação Polinomial (PAM) presente em Tumelero (2015). Os resultados obtidos para a densidade de nêutrons são apresentados na Tabela 20 fazendo-se uso de passo de tempo de $\Delta t = 0,001 \text{ s}$. Os gráficos da temperatura para os três casos de reatividade são apresentados nas Figuras 15, 16 e 17.

Para cálculo dos respectivos desvios relativos, apresentados na Tabela 21, utilizam-se os dados numéricos dos métodos BEFD e ROS. Ao analisar os resultados, observa-se uma boa aproximação dos valores da densidade do método proposto aos do método BEFD. Em alguns casos obteve-se uma aproximação de todas as casas decimais quando comparado ao do método BEFD. Os gráficos da temperatura para inserção de reatividade constante comportaram-se de forma semelhante. No início do intervalo obtém-se um pico e, logo após, mantém-se praticamente constante durante o resto do tempo. De forma geral, conseguiu-se obter bons resultados para o problema de temperatura com reatividade constante pelo método de Rosenbrock.

Tabela 20: Densidade de nêutrons em cm^{-3} para inserção de reatividade constante com realimentação de temperatura.

Reatividade	$t(\text{s})$	ROS	BEFD	PAM
		$\Delta t = 0,001\text{s}$		$\Delta t = 0,0001\text{s}$
$\rho = 1\beta$	10	132,0385963	132,0385964	132,0360488
	20	51,60366312	51,69986095	51,69886781
	30	28,17610878	28,17468536	28,17421067
	40	18,14632998	18,14633000	18,14605626
	50	12,77957702	12,77957703	12,77939848
	60	9,474932501	9,474932501	9,474806263
	70	7,244477497	7,244477494	7,244383322
	80	5,646426409	5,646289700	5,646216922
	90	4,456937470	4,456834255	4,456776689
	100	3,550182170	3,550102766	3,550056532
$\rho = 1,5\beta$	10	107,9116828	107,9116832	107,8782873
	20	41,60724261	41,60428128	41,59240359
	30	23,30005066	23,29893150	23,29295293
	40	15,30342748	15,30342749	15,29976806
	50	10,89014313	10,89014315	10,88764407
	60	8,101031851	8,101031859	8,099208379
	70	6,182690454	6,182690459	6,181303562
	80	4,793427007	4,793307820	4,792224927
	90	3,755704648	3,755614629	3,754754694
	100	2,966143921	2,966074952	2,965384313
$\rho = 2\beta$	10	103,3808502	103,3808535	103,2824514
	20	39,14165018	39,13886903	39,10307186
	30	22,00482518	22,00377721	21,98505236
	40	14,49367189	14,49367193	14,4818771
	50	10,31861107	10,31861108	10,31040763
	60	7,663319200	7,663319203	7,657272581
	70	5,829395378	5,829395378	5,824777758
	80	4,499541133	4,499427073	4,495821922
	90	3,507508598	3,507422663	3,504567484
	100	2,755192461	2,755126886	2,752843461

Tabela 21: Desvios relativos para inserção de reatividade constante com realimentação de temperatura.

Reatividade	$t(s)$	Desvio Relativo $\frac{ ROS-BEFD }{BEFD}$
$\rho = 1\beta$	10	$7,5735430947 \times 10^{-10}$
	20	$1,8606979058 \times 10^{-3}$
	30	$4,7626822885 \times 10^{-5}$
	40	$2,7598251287 \times 10^{-9}$
	50	$9,6912267770 \times 10^{-10}$
	60	$3,9147527599 \times 10^{-10}$
	70	0,000000000
	80	$2,5349894141 \times 10^{-5}$
	90	$2,3158815000 \times 10^{-5}$
	100	$2,2366676469 \times 10^{-5}$
$\rho = 1,5\beta$	10	$3,7067348792 \times 10^{-9}$
	20	$7,1178491945 \times 10^{-5}$
	30	$4,8034820824 \times 10^{-5}$
	40	$6,5344838641 \times 10^{-10}$
	50	$1,8365231498 \times 10^{-9}$
	60	$9,8752851972 \times 10^{-10}$
	70	$8,0870941755 \times 10^{-10}$
	80	$2,4865292294 \times 10^{-5}$
	90	$2,3969179187 \times 10^{-5}$
	100	$2,3252615364 \times 10^{-5}$
$\rho = 2\beta$	10	$3,1920804368 \times 10^{-8}$
	20	$7,1058517247 \times 10^{-5}$
	30	$4,7626822885 \times 10^{-5}$
	40	$2,7598251287 \times 10^{-9}$
	50	$9,6912267770 \times 10^{-10}$
	60	$3,9147527599 \times 10^{-10}$
	70	0,000000000
	80	$2,5349894141 \times 10^{-5}$
	90	$2,4500896600 \times 10^{-5}$
	100	$2,3801081660 \times 10^{-5}$

Figura 15: Temperatura para reatividade $\rho = 1\beta$.

Figura 16: Temperatura para reatividade $\rho = 1,5\beta$.

Figura 17: Temperatura para reatividade $\rho = 2\beta$.

5.4 Inserção de Reatividade Rampa com *feedback* Newtoniano

Para este caso de reatividade consideram-se as equações da Cinética Pontual de Nêutrons com o modelo de *feedback* newtoniano, dado por,

$$\rho(t, n) = \rho_0(t) - B \int_0^t n(t') dt', \quad (77)$$

em que B é o “coeficiente de desligamento” do sistema do reator (AHMAD et al., 2020). Pode-se ainda reescrever a Equação (77) como:

$$\frac{d\rho(t, n)}{dt} = \frac{d\rho_0}{dt} - Bn(t). \quad (78)$$

Assim, fica-se com o sistema de equações diferenciais descritos na Equação (79).

$$\begin{aligned} \frac{dn(t)}{dt} &= \frac{\rho(t, n) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(t), \\ \frac{dC_i(t)}{dt} &= \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t), \\ \frac{d\rho(t, n)}{dt} &= \frac{d\rho_0}{dt} - Bn(t), \end{aligned} \quad (79)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$, com as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned} n(0) &= n_0, \\ C_i(0) &= \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0, \\ \rho(0, n_0) &= \rho_{0, n_0}, \end{aligned} \quad (80)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$.

Neste caso de inserção de reatividade Rampa com *feedback* newtoniano, utilizam-se os parâmetros cinéticos da Tabela 9, considerando quatro valores para a reatividade: $\rho = 0,1t\%$, $\rho = 0,01t\%$, $\rho = 0,003t\%$ e $\rho = 0,001t\%$ e dois valores para o parâmetro B : $B = 10^{-11}$ e $B = 10^{-13}$. Os resultados obtidos para a densidade de nêutrons são apresentados nas Tabelas 22 e 23 com passo de tempo de $\Delta t = 0,0001s$ e $\Delta t = 0,0001/2s$. Os respectivos desvios relativos encontram-se nas Tabelas 24 e 25. Para o cálculo dos desvios relativos utilizaram-se os dados do método ROS com $\Delta t = 0,0001/2s$. Observa-se pelas Tabelas 22 e 23 que os resultados obtidos são excelentes quando comparados aos do método EPCA. Entretanto, nota-se que há um pico no valor da densidade em $t = 0,1s$ para reatividade $\rho = 0,1t\%$ em ambos os casos, ocorrendo um maior valor no desvio relativo. Com isso, utilizou-se um passo de integração menor, em todo o domínio, para uma melhor aproximação da densidade nesse instante em que ocorre essa grande variação da densidade em um curto intervalo

de tempo. Fazendo-se uso do passo de tempo de $\Delta t = 0,0001/2s$ verificou-se em ambas as Tabelas que os resultados são melhores, possuindo um maior erro relativo de $2,4621576828 \times 10^{-8}$ em $t = 0,5s$ com reatividade $\rho = 0,1t\%$ e $B = 10^{-13}$. Em geral, na maioria dos casos há uma aproximação de todas as casas decimais quando comparados aos do método EPCA.

Neste sentido, observa-se que o método Rosenbrock produziu excelentes resultados quando comparados com os da literatura ao resolver um problema não linear com e sem dependência temporal na reatividade, considerando os efeitos de temperatura. Além disso, vale destacar que neste caso, com reatividade do tipo rampa e efeitos temperatura, os resultados foram os melhores quando comparados com os outros casos gerados.

Tabela 22: Densidade de nêutrons em cm^{-3} com *feedback* $B = 10^{-11}$ e diferentes casos de reatividade do tipo rampa.

Reatividade	$t(s)$	ROS	ROS	EPCA
		$\Delta t = 0,0001s$	$\Delta t = 0,0001/2s$	
$\rho = 0,1t\%$	0,1	24,5442329	24,7336582	24,7336582
	0,5	$9,94989391E + 09$	$9,94989333E + 09$	$9,94989324E + 09$
	5	$1,00297411E + 10$	$1,00297404E + 10$	$1,00297404E + 10$
	7,5	$1,00179842E + 10$	$1,00179842E + 10$	$1,00179842E + 10$
	10	$1,00118861E + 10$	$1,00118861E + 10$	$1,00118861E + 10$
$\rho = 0,01t\%$	0,1	1,1669969	1,167210837	1,167210838
	0,5	4,2699528	4,269952844	4,269952844
	5	$1,033799130E + 09$	$1,033798290E + 09$	$1,033798290E + 09$
	7,5	$1,019490285E + 09$	$1,019490285E + 09$	$1,019490285E + 09$
	10	$1,012431671E + 09$	$1,012431671E + 09$	$1,012431671E + 09$
$\rho = 0,003t\%$	0,1	1,045319438	1,045371666	1,045371666
	0,5	1,324661984	1,324661984	1,324661985
	5	$3,29326975E + 08$	$3,29326626E + 08$	$3,293266270E + 08$
	7,5	$3,22719218E + 08$	$3,22719218E + 08$	$3,227192182E + 08$
	10	$3,14593641E + 08$	$3,14593641E + 08$	$3,145936416E + 08$
$\rho = 0,001t\%$	0,1	1,014701312	1,014717771	1,014717771
	0,5	1,089821393	1,089821393	1,089821394
	5	14,16153344	14,16371139	14,16371139
	7,5	$1,259267838E + 09$	$1,259267838E + 09$	$1,259267838E + 09$
	10	$1,59005860E + 08$	$1,59005860E + 08$	$1,590058602E + 08$

Tabela 23: Densidade de nêutrons em cm^{-3} com *feedback* $B = 10^{-13}$ e diferentes casos de reatividade do tipo rampa.

Reatividade	$t(\text{s})$	ROS	ROS	EPCA
		$\Delta t = 0,0001\text{s}$	$\Delta t = 0,0001/2\text{s}$	
$\rho = 0,1t\%$	0,1	24,54423294	24,73365825	24,73365830
	0,5	$1,543361833E + 12$	$1,543361792E + 12$	$1,543361754E + 12$
	5	$1,002974158E + 12$	$1,002974092E + 12$	$1,002974092E + 12$
	7,5	$1,001798437E + 12$	$1,001798437E + 12$	$1,001798437E + 12$
	10	$1,001188620E + 12$	$1,001188620E + 12$	$1,001188621E + 12$
$\rho = 0,01t\%$	0,1	1,166996855	1,167210837	1,167210838
	0,5	4,269952864	4,269952864	4,269952865
	5	$1,03389051E + 11$	$1,033889665E + 11$	$1,033889665E + 11$
	7,5	$1,019499912E + 11$	$1,019499912E + 11$	$1,019499913E + 11$
	10	$1,012434883E + 11$	$1,012434883E + 11$	$1,012434883E + 11$
$\rho = 0,003t\%$	0,1	1,045319438	1,045371666	1,045371667
	0,5	1,324661986	1,324661986	1,324661986
	5	$3,215677645E + 10$	$3,215676113E + 10$	$3,215676113E + 10$
	7,5	$3,210205182E + 10$	$3,210205182E + 10$	$3,210205182E + 10$
	10	$3,145614686E + 10$	$3,145614686E + 10$	$3,145614687E + 10$
$\rho = 0,001t\%$	0,1	1,014701313	1,014717771	1,014717771
	0,5	1,089821394	1,089821394	1,089821395
	5	14,16153590	14,16371386	14,16371386
	7,5	$8,361617706E + 09$	$8,361617706E + 09$	$8,361617606E + 09$
	10	$1,615876766E + 10$	$1,615876766E + 10$	$1,615876767E + 10$

Tabela 24: Desvios relativos para inserção de diferentes casos de reatividade do tipo rampa com *feedback* $B = 10^{-11}$ para $\Delta t = 0,0001/2s$.

Reatividade	$t(s)$	Desvio Relativo
$\rho = 0,1t\%$	0,1	0,00000000
	0,5	$9,0453231837 \times 10^{-9}$
	5	0,00000000
	7,5	0,00000000
	10	0,00000000
$\rho = 0,01t\%$	0,1	$8,5674324418 \times 10^{-10}$
	0,5	0,00000000
	5	0,00000000
	7,5	0,00000000
	10	0,00000000
$\rho = 0,003t\%$	0,1	0,00000000
	0,5	$7,5490956283 \times 10^{-10}$
	5	$3,0364990802 \times 10^{-9}$
	7,5	$6,1973377698 \times 10^{-10}$
	10	$1,9072222723 \times 10^{-9}$
$\rho = 0,001t\%$	0,1	0,00000000
	0,5	$9,1758154639 \times 10^{-10}$
	5	0,00000000
	7,5	0,00000000
	10	$1,2578152764 \times 10^{-9}$

Tabela 25: Desvios relativos para inserção de diferentes casos de reatividade do tipo rampa com *feedback* $B = 10^{-13}$ para $\Delta t = 0,0001/2s$.

Reatividade	$t(s)$	Desvio Relativo
$\rho = 0,1t\%$	0,1	$2,0215367817 \times 10^{-9}$
	0,5	$2,4621576828 \times 10^{-8}$
	5	0,000000000
	7,5	0,000000000
	10	$9,9881279014 \times 10^{-10}$
$\rho = 0,01t\%$	0,1	$8,5674324418 \times 10^{-10}$
	0,5	$2,3419462266 \times 10^{-10}$
	5	0,000000000
	7,5	$9,8087306065 \times 10^{-10}$
	10	0,000000000
$\rho = 0,003t\%$	0,1	$9,5659757344 \times 10^{-10}$
	0,5	0,000000000
	5	0,000000000
	7,5	0,000000000
	10	$3,1790289005 \times 10^{-10}$
$\rho = 0,001t\%$	0,1	0,000000000
	0,5	$9,1758154555 \times 10^{-10}$
	5	0,000000000
	7,5	$1,1959408419 \times 10^{-8}$
	10	$6,1885907417 \times 10^{-10}$

5.5 Inserção de Reatividade Constante com os efeitos dos venenos

Nesta seção, apresenta-se a solução das equações da Cinética Pontual com os efeitos dos principais venenos absorvedores de nêutrons. Considera-se reatividade do tipo constante e um grupo de precursores de nêutrons atrasados.

No primeiro caso de simulação, considerou-se um reator em baixa potência com reatividade negativa, $\rho = -0,0001$, gerado até 100 h para a densidade de nêutrons, concentração de precursores de nêutrons atrasados e para a concentração do Xenônio-135. Para a concentração do Samário-149, o gráfico foi gerado até 400 h. Usou-se os seguintes parâmetros cinéticos: $\beta = 0,0065$, $\lambda = 278,68 \text{ h}^{-1}$ e $\Lambda = 2,7778 \times 10^{-8} \text{ h}$ com condições iniciais e parâmetros nucleares encontrados em Paganim (2018).

Os gráficos para a densidade de nêutrons, concentração de precursores de nêutrons atrasados, concentração do Xenônio-135 e do Samário-149 são mostrados respectivamente nas Figuras 18, 19, 20 e 21.

É válido salientar que os gráficos da densidade de nêutrons e concentração de precursores de nêutrons atrasados assemelham-se aos gráficos presentes em Paganim (2018). Entretanto, ao comparar os gráficos do comportamento do Xenônio-135 e Samário-149, nota-se diferença nas escalas para as concentrações, mas possuindo comportamento semelhante aos de Paganim. Porém, no referido trabalho, consideram-se os efeitos também dos transurânicos ao modelo o que influenciou no valor das escalas das concentrações dos venenos absorvedores de nêutrons.

Observa-se pelas Figuras 18 e 19 que a densidade de nêutrons e a concentração de precursores de nêutrons atrasados possuem um comportamento semelhante. Ambos decaem depois de um tempo, devido a reatividade negativa, ocasionando o desligamento do reator.

Quando o reator está prestes a se desligar, o Xenônio-135 cresce rapidamente pela geração através da fissão e também pelo decaimento do Iodo-135, até atingir seu pico em aproximadamente dez horas. Contudo, observa-se que a concentração do Xenônio-135 permanece no reator por até oitenta horas, cerca de três dias, diminuindo sua concentração pela redução do Iodo-135 e pelo seu próprio decaimento. Uma retomada da potência durante esse período de contaminação necessitaria de mais nêutrons para compensar a reatividade negativa causada pelo envenenamento. Portanto, salienta-se a importância em se esperar pelo menos três dias para o religamento seguro de um reator nuclear após parada em sua operação.

O Samário-149, diferentemente do Xenônio-135, cresce até um determinado valor e se estabiliza depois de um tempo, aproximando-se para um valor constante em sua concentração durante a operação do reator até o decaimento completo do

Promécio-149.

Figura 18: Densidade de nêutrons para reatividade constante $\rho = -0,0001$ com efeitos dos venenos.

Figura 19: Concentração de precursores de nêutrons atrasados com $\rho = -0,0001$.

Figura 20: Concentração de Xenônio-135 com $\rho = -0,0001$.

Figura 21: Concentração de Samário-149 com $\rho = -0,0001$.

No segundo caso de simulação, usou-se como condição inicial os resultados no instante 30 h do primeiro caso. A simulação consiste em religar o reator antes do Xenônio-135 se consumir. Para isso, inseriu-se uma reatividade positiva, $\rho = 0,01\beta$, para captar os efeitos dos venenos absorvedores de nêutrons na retomada da potência em um reator já contaminado.

Os resultados do comportamento da densidade de nêutrons, concentração de precursores, concentração do Xenônio-135, concentração do Promécio-149 e do elemento Samário-149 estão respectivamente apresentados nas Figuras 22, 23, 24, 25 e 26.

Figura 22: Densidade de nêutrons para reatividade constante $\rho = 0,01\beta$ com efeitos dos venenos.

Figura 23: Concentração de precursores de nêutrons atrasados com $\rho = 0,01\beta$.

Figura 24: Concentração de Xenônio-135 com $\rho = 0,01\beta$.

Figura 25: Concentração de Promécio-149 com $\rho = 0,01\beta$.

Figura 26: Concentração de Samário-149 com $\rho = 0,01\beta$.

As condições iniciais impostas no reator descrevem um sistema já contaminado pelos venenos absorvedores de nêutrons em sua fase de quase desligamento. Pela inserção da reatividade positiva, no tempo de aproximadamente 55 h acontece um pico no valor da densidade de nêutrons (Fig. 22) e na concentração de precursores de nêutrons atrasados (Fig. 23). Em consequência, observa-se pela Fig. 25, que há um aumento abrupto na concentração do Promécio-149, o que leva a um aumento significativo na concentração do Samário-149 (Fig. 26) no reator. Como o Samário-149 é um forte absorvedor de nêutrons, o valor da densidade diminui, o que leva novamente a contaminação por Xenônio-135 que, por sua vez, atinge seu pico em aproximadamente 70 h.

Observa-se pelos gráficos que tanto a densidade de nêutrons quanto a concentração de precursores vai a quase zero quando o pico de Xenônio-135 se aproxima, ou seja, a reatividade negativa causada pelo envenenamento do núcleo faz com que o reator praticamente se desligue. Nota-se que a concentração do Samário-149 não desaparece no reator por ele ser um elemento estável, mantendo-se constante, diferentemente do Xenônio-135 que desaparece depois de um tempo.

É válido salientar também que os parâmetros utilizados caracterizam um reator com combustível novo. Em geral, há um aproveitamento desse combustível usado até a terceira geração, permitindo que o Samário-149 se mantenha dentro do núcleo do reator durante muito tempo.

Com isso, é importante conhecer o comportamento do fluxo de nêutrons quando há o envenenamento do núcleo para que haja uma retomada segura da potência a medida que ela deve ser feita aos poucos, até que os venenos sejam consumidos.

Diante dos resultados obtidos, verificou-se que a metodologia atingiu o objetivo ao simular o comportamento dos venenos de forma satisfatória, na medida que os gráficos tem sentido físico condizente ao que se espera das equações diferenciais ordinárias.

6 SIMULAÇÃO DO ACIDENTE EM CHERNOBYL

Neste capítulo, resolvem-se as equações da Cinética Pontual de Nêutrons com os efeitos dos venenos e temperatura trazendo o contexto do acidente em Chernobyl. O objetivo é analisar a influência dos venenos absorvedores de nêutrons e temperatura no comportamento final da potência.

Como ilustra a Figura 27, é conhecida a potência em algumas etapas até o acidente. A linha do tempo inicia-se às 13h do dia 25 de abril e termina na explosão do núcleo às 1h : 23 min : 48s do dia 26 de abril. Dito isso, a partir das potências conhecidas, propôs-se estimativas para a reatividade em cada intervalo. A proposta consiste em usar as equações da Cinética Pontual Inversas para determiná-las.

Figura 27: Intervalos do acidente em Chernobyl.

A reatividade $\rho(t)$ necessária para causar o transiente de potência desejado $P(t)$ pode ser obtido a partir da equação da Cinética do Pontual Inversa (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976), definida como

$$\rho(t) = \beta + \frac{\Lambda}{P(t)} \frac{dP(t)}{dt} - \frac{\Lambda}{P(t)} \sum_{j=1}^6 \lambda_j C_j(t) \quad (81)$$

$$\frac{dC_j(t)}{dt} = \frac{\beta_j}{\Lambda} P(t) - \lambda_j C_j(t), \quad j = 1, 2, \dots, 6.$$

Cabe ressaltar neste momento que desconsideram-se os efeitos dos venenos e da temperatura para construir as estimativas das reatividades em cada intervalo. Portanto, admite-se esta simplificação devido a complexidade do problema. Salienta-se também que a variável P aqui é a densidade de nêutrons que representa um determinado nível de potência do reator.

Para cada intervalo mencionado na Figura 27, calcula-se uma função potência associada. Assume-se que a potência terá um formato exponencial da forma,

$$P_1 = P_0 e^{wt}, \quad (82)$$

em que P_1 e P_0 são, respectivamente, os valores das potências no fim e no início de cada intervalo, w é definido como $1/\mathcal{T}$, sendo $\mathcal{T}$ o período do reator dado em horas. Desta forma, necessita-se encontrar o valor do período do reator, visto que é conhecido o tempo, convertido para horas, e a potência no início e no fim de cada intervalo.

Como ilustração, segue o cálculo da função potência P_I que define o primeiro intervalo,

$$\begin{aligned} P_1 &= P_0 e^{wt}, \\ 1600 &= 3200 e^{\frac{0,08}{\mathcal{T}}}, \\ w &= \frac{1}{\mathcal{T}} = -8,6643, \\ P_I &= 3200 e^{-8,6643t}. \end{aligned} \quad (83)$$

Para os demais intervalos, o cálculo da função potência segue de forma análoga. As funções encontradas nos intervalos de I à VI, são:

$$\begin{aligned} P_I &= 3200 e^{-8,6643t}, \\ P_{II} &= 1600 e^{-0,1297378t}, \\ P_{III} &= 720 e^{-8,363721t}, \\ P_{IV} &= 30 e^{3,579452t}, \\ P_V &= 200 e^{2,564635t}, \\ P_{VI} &= 530 e^{3728,56t}. \end{aligned} \quad (84)$$

Nesta simulação, considera-se apenas um grupo de precursores de nêutrons atrasados. Os parâmetros cinéticos utilizados encontram-se no relatório de Chan et al. (1988) sobre o acidente de Chernobyl, para seis grupos de precursores. Com isso, necessita-se converter os parâmetros para um grupo, onde obtêm-se os seguintes parâmetros: $\beta = 0,0056$, $\lambda = 291,4840044797 \text{ h}^{-1}$, $\Lambda = 10^{-8} \text{ h}$. Os parâmetros nucleares referentes aos venenos, utilizam-se os encontrados em Paganim (2018). Com relação a temperatura, admite-se a constante de proporcionalidade entre temperatura e densidade de nêutrons $H = 2,5 \times 10^{-6} \frac{\text{K}}{\text{MWs}}$ (TUMELERO, 2015) e coeficiente de temperatura da reatividade, $\alpha = 2 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$, encontrado em Fletcher et al. (1988).

As condições iniciais impostas consideram um reator inicialmente sem a presença dos venenos absorvedores de nêutrons, temperatura média de funcionamento de um reator RBMK-1000, $T_0 = 500 \text{ K}$, potência térmica inicial $P_0 = 3200 \text{ MWt}$ e, por fim, concentração inicial dos precursores de nêutrons $C_0 = \frac{3200\beta}{\Lambda\lambda} \text{ cm}^{-3}$.

Os resultados do comportamento da potência, concentração dos precursores de nêutrons atrasados, concentrações dos venenos produtos de fissão e temperatura

de cada intervalo na linha do tempo, são apresentados começando na Figura 28 até a Figura 33. Devido a grande variação nas escalas dos gráficos, apresentam-se as simulações dos intervalos de forma independente, assumindo os resultados do intervalo anterior como condições iniciais para o próximo intervalo.

É válido salientar que o acidente em Chernobyl aconteceu devido a inúmeros fatores como defeitos nos materiais, erros de processo, entre outros. Nesta simulação, desconsideram-se os efeitos termo-hidráulicos do sistema.

Nas primeiras horas da tarde do dia 25 de abril de 1986, está previsto a redução da potência para a realização do teste de segurança do reator número 4 da usina. De acordo com o programa de ensaio, a potência deveria estar entre 700 MWt à 1000 MWt para começar o teste (CHAN et al., 1988). No entanto, o teste não aconteceu neste dia devido a demanda de energia elétrica naquele momento, tendo que ser adiado. Enquanto isso, o reator operava com a metade da capacidade de potência.

Na Figura 28 mostra-se o comportamento dos eventos no primeiro intervalo, nota-se que a potência térmica, item (a), decai exponencialmente, porém não atinge o valor da literatura, pois desconsideram-se aqui os efeitos termo-hidráulicos do sistema. Contudo, observa-se que o gráfico da potência obtém um comportamento físico coerente com o esperado, decaindo ao longo do tempo.

Os venenos produtos de fissão, por sua vez, possuem um crescimento exponencial. O Iodo-135, assim como o Promécio-149, de acordo com suas variações, surgem através da fissão nuclear e decrescem pelos seus próprios decaimentos radioativos. Os elementos Xenônio-135 e Samário-149 são produzidos através da fissão nuclear e também, através do decaimento dos outros elementos (Xenônio-135 “nasce” através do decaimento radioativo do Iodo-135 e Samário-149 através do Promécio-149) e decrescem pelos seus próprios decaimentos radioativos e também pela absorção dos nêutrons. Como o reator estava operando com a metade da capacidade de potência por um longo período, o Xenônio-135, sendo um forte absorvedor de nêutrons, não foi queimado totalmente, contaminando o núcleo e contribuindo para redução da potência do reator.

O Samário-149, assim como o Xenônio-135, aumenta também sua concentração dentro do núcleo, por ele ser um forte absorvedor de nêutrons, termina contribuindo novamente para a diminuição da potência. O valor da temperatura, por sua vez, mantém-se praticamente constante durante as primeiras horas.

No segundo intervalo de simulação, cerca de 11 horas de operação do reator com metade da capacidade da potência térmica, o reator chega a uma potência de 720 MWt. Pela Figura 29 item (a), nota-se a redução ainda da potência. Em razão da contínua diminuição da potência, infere-se pelos itens (b) e (d), que os elementos Iodo-135 e Promécio-149 começam a sofrer queda no valor de suas concentrações justamente pela diminuição no número de fissões dentro do núcleo do reator. Do contrário, tem-se o

elemento Xenônio-135 “nascendo” ainda através do decaimento radioativo do Iodo-135 e o Samário-149 através do decaimento do elemento Promécio-149.

Na Figura 30 itens (b) e (d), nota-se que as concentrações dos elementos Iodo-135 e Promécio-149 continuam a decrescer. Nesse momento, começa a atingir um pico nos valores das concentrações dos elementos Xenônio-135 e Samário-149, lembrando que esses elementos são fortes absorvedores de nêutrons.

No terceiro intervalo, de acordo com fontes sobre o acidente, o reator atinge uma potência térmica de apenas 30 MWt causado pelo envenenamento. Na Figura 30 item (a), nota-se que a simulação neste caso, atingiu um valor próximo a do acidente.

Observa-se pelos itens (c) e (e) da Figura 30, que o Xenônio-135 atinge um valor próximo de $5 \times 10^7 \text{ cm}^{-3}$ em sua concentração e o Samário-149, um valor de $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$. Nota-se que esses valores nas concentrações destes dois elementos se mantiveram praticamente nesta faixa ao longo dos intervalos.

O quarto intervalo do acidente é caracterizado pela retirada das barras de controle e a recondução da potência para 200 MWt, com o intuito de começar o teste de segurança. Devido a reatividade negativa causada pelos venenos absorvedores de nêutrons os operadores infringiram inúmeras normas de segurança e procedimentos para tentar atingir um nível de potência na faixa de 700 MWt à 1000 MWt necessária para realização do teste. Contudo, a combinação destes erros desencadeou uma cascata de eventos necessária para tornar o reator instável e a caminho da excursão de energia. A partir disso, o teste começa mesmo com as funções de proteção e de segurança desativadas.

Nota-se pela Figura 31 item (a), que a potência começa a crescer, simulando a retomada de potência devido a retirada das barras de controle para início do teste. Devido ao aumento no fluxo de nêutrons, observa-se que a concentração do Promécio-149, item (d), torna a aumentar. O mesmo acontece para o elemento Iodo-135, como mostra no item (b) da Figura 31. A perda através do decaimento radioativo, tanto do Promécio-149, quanto do Iodo-135, não é capaz de superar sua produção através da fissão.

Da mesma forma, os elementos Xenônio-135 e Samário-149 mantêm seu crescimento, como observa-se na Figura 32 itens (c) e (e). A taxa de produção desses elementos torna-se relativamente superior aos de perda.

Nos segundos finais antes do acidente, descrito pelo intervalo VI, o reator está praticamente fora de controle com a potência aumentando rapidamente. Os controles de emergência haviam sido desligados e a maior parte das barras de controle que servem para absorver nêutrons e controlar a fissão nuclear haviam sido retiradas. O fechamento da principal válvula para condensador devido ao aumento na vazão de água no início do teste causa um aumento no coeficiente de reatividade positiva. Ou seja, a elevação na temperatura desencadeia um aumento de vapor, surgindo bolhas que impedem a absorção dos nêutrons, aumentando ainda mais a potência.

Com o fluxo de nêutrons aumentando, o próprio sistema automaticamente insere as barras de controle, porém não é suficiente para compensar o incremento de reatividade provocado pelo aumento de vapor. Diante disso, os operadores apertam o botão AZ-5, que insere todas as barras de controle no núcleo, mas devido ao calor extremo, as barras de combustíveis sofrem uma deformação, impedindo a passagem das mesmas. Então, a alimentação elétrica que aciona as barras é cortada para que elas pudessem descer apenas impulsionadas pelo seu próprio peso. Porém, na ponta das barras de controle havia grafite que ao penetrarem no núcleo do reator instável, terminou aumentando ainda mais a potência. A partir disso, era só questão de tempo até a explosão do núcleo. Com a redução da vazão do fluido refrigerante, o calor e o vapor se tornaram incontrolláveis, fazendo com que a pressão dentro do núcleo excedesse o nível considerado para acidente. Até que segundos depois acontece a explosão térmica do núcleo.

Em Fletcher et al. (1988), apresenta-se a temperatura média do combustível durante o acidente, primeiramente se mantém constante nos 500 K, até a excursão da potência, ultrapassando os 2000 K. Neste último intervalo, como não se tem especificamente o parâmetro H e devido aos acontecimentos que provocaram mudanças drásticas no núcleo do reator, que pode ter alterado a relação de linearidade entre temperatura e densidade, estimou-se o parâmetro a partir de uma aproximação mais real da temperatura na excursão da potência, obtendo-se um valor de $H = 33 \frac{\text{K}}{\text{MW}_s}$ e temperatura atingindo cerca de 2000 K como mostra a Figura 33 item (f). Observa-se pelo item (a) da Figura 33 que a potência no intervalo final, atingiu aproximadamente 550 000 MWt, coincidindo com o valor mencionado em Fletcher et al. (1988). Da mesma forma, tem-se também um crescimento exponencial nas concentrações dos venenos absorvedores de nêutrons neste último intervalo de simulação.

A simulação, de maneira geral, atingiu o objetivo, mostrando a influência que os venenos produtos de fissão e temperatura tiveram no comportamento da potência no acidente em Chernobyl. Deste modo, pôde-se salientar a importância em se esperar o tempo necessário para a queima dos venenos produtos de fissão devido aos efeitos de inserção de reatividade negativa causada pelo envenenamento para a retomada segura da potência. Além disso, pelo fato do modelo não incluir os efeitos termo-hidráulicos, os valores da potência, em alguns casos, não atingiram os encontrados na literatura, porém os resultados obtidos tem coerência física com o que se esperava em cada uma das etapas do acidente. É válido salientar também, que o modelo da Cinética Pontual, apesar de simples, conseguiu extrair informações físicas coerentes para que pudesse prever a situação do reator até o acidente. O método de Rosenbrock obteve um desempenho satisfatório ao resolver um modelo complexo na inserção dos efeitos dos venenos e temperatura, considerando a não linearidade do sistema.

Figura 28: Gráficos do Intervalo I, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

Figura 29: Gráficos do Intervalo II, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

Figura 30: Gráficos do Intervalo III, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.

Figura 31: Gráficos do Intervalo IV, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.

(a)

(b)

(c)

(d)

(e)

(f)

Figura 32: Gráficos do Intervalo V, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.

Figura 33: Gráficos do Intervalo VI, (a) Potência Térmica, (b) Concentração de Iodo-135, (c) Concentração de Xenônio-135, (d) Concentração de Promécio-149, (e) Concentração de Samário-149, (f) Temperatura.

7 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Nesta dissertação, com o intuito de verificar a metodologia, apresentou-se a solução das equações da Cinética Pontual de Nêutrons pelo método de Rosenbrock de quarta ordem e de quatro estágios, considerando-se um e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados e inserções de reatividades constantes, rampa, quadrática, senoidal, zig-zag e fonte pulsada. Expôs-se também, a solução do modelo com os efeitos de temperatura para inserção de reatividade constante e do tipo rampa, considerando seis grupos de precursores de nêutrons. Por fim, apresentou-se a solução das equações da Cinética Pontual, incluindo os efeitos dos principais venenos absorvedores de nêutrons. Após verificação, mostrou-se os resultados do modelo da Cinética Pontual de Nêutrons acrescentando os efeitos de temperatura e venenos produtos de fissão dentro de um contexto histórico e técnico do acidente em Chernobyl.

De maneira geral, a facilidade de implementação do algoritmo, a possibilidade de fazer uso de passo de tempo adaptativo por ser um método de passo único, além dos resultados satisfatórios da literatura diante da solução de equações rígidas, tornou o método de Rosenbrock a escolha para a solução do modelo acoplados aos efeitos de temperatura e dos principais venenos produtos de fissão, visto que se tratam de problemas não lineares e uma solução analítica pode se tornar inviável. Foram testados também os vários parâmetros do método Rosenbrock e suas diferentes estruturas encontradas na literatura.

Pôde-se verificar diante dos resultados que o método de Rosenbrock produziu resultados consistentes com o esperado, superando o grau de rigidez do sistema de EDO's. Conforme mostrado nas tabelas, observou-se que ao diminuir o passo de tempo, a solução tende a se aproximar dos resultados presentes na literatura. A simulação do acidente em Chernobyl produziu resultados satisfatórios, coerentes com a situação física de cada etapa do acidente.

Um dos fatores que contribuíram para o desastre em Chernobyl foram os efeitos dos venenos, em especial o Xenônio-135 por possuir uma alta seção de choque de absorção neutrônica. O retardo da resposta da potência do reator aos comandos dos operadores da usina devido ao envenenamento do núcleo, levaram os operadores

a tomar uma medida arriscada ao retirar praticamente todas as barras de controle do sistema. Em decorrência, inúmeros procedimentos proibidos foram tomados com o intuito de retomar a potência em um determinado valor para realizar um teste de segurança. Com isso, a instabilidade do reator estava assegurada e o acidente era questão de tempo para acontecer.

Diante do que foi exposto, a motivação e o destaque desta pesquisa foi a análise dos efeitos de temperatura e dos venenos absorvedores de nêutrons no comportamento final da potência, trazendo o acidente em Chernobyl como foco principal. Ainda que o modelo considere somente a variação da amplitude da densidade de nêutrons com o tempo, o objetivo foi obter uma ideia física, mesmo que primária, do comportamento da potência térmica do reator, considerando os efeitos de temperatura e venenos em cada etapa do acidente. Entender o efeito da reatividade negativa ocasionada pelos venenos e os de temperatura no comportamento final da potência, permite direcionar medidas seguras para o controle e retomada segura da potência de um reator nuclear.

Cabe salientar, que em nosso conhecimento, a simulação da retomada da potência partindo de um reator já contaminado pelos venenos absorvedores de nêutrons e a abordagem feita para simular as características preliminares do acidente em Chernobyl é novidade diante da literatura, evidenciando novamente a importância deste trabalho.

Como perspectivas futuras, pretende-se expandir a ideia proposta nesta dissertação, utilizando o modelo da Cinética Espacial de Nêutrons, que descreve a variação temporal e espacial da população de nêutrons, investigando-se outros métodos numéricos capazes de resolver esse problema rígido e não linear. Pretende-se também, simular outros casos do acidente, como uma retomada da potência após o tempo de queima dos venenos produtos de fissão.

REFERÊNCIAS

- ABOANBER, A. E.; NAHLA, A. A.; AL-MALKI, F. A. Stability of the analytical perturbation for nonlinear coupled kinetics equations. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON MATHEMATICS, TRENDS AND DEVELOPMENT ICMTD12, 2012, **Anais...**, 2012. p.MCI-01.
- AHMAD, I.; ZAHUR, A.; SHAUKAT, N.; AHMED, R.; SAMEE, A.; AHMAD, S. Generating Function Method for the solution of point reactor kinetic equations. **Progress in Nuclear Energy**, [S.l.], v.123, p.103 – 286, 2020.
- BUI, T. D. Some A-Stable and L-Stable Methods for the Numerical Integration of Stiff Ordinary Differential Equations. **Journal of the Association for Computing Machinery (ACM)**, New York, NY, USA, v.26, n.3, p.483 – 493, July 1979.
- BUTCHER, J. C. Implicit Runge-Kutta Processes. **Mathematics of Computation**, American Mathematical Society, v.18, n.85, p.50 – 64, 1964.
- CASTILHO, M. A.; SUGUIMOTO, D. Y. d. L. Chernobyl - A catástrofe. **Revista da Universidade Vale do Rio Verde, Três Corações**, MG, v.12, p.316 – 322, 12 2014.
- CEOLIN, C. **Solução Analítica da Equação Cinética de Difusão Multigrupo de Nêutrons em Geometria Cartesiana Unidimensional Pela Técnica da Transformada Integral**. 2010. Dissertação de Mestrado — UFRGS, Porto Alegre/RS.
- CHAN, P. S. W.; DASTUR, A. R.; GRANT, S. D.; HOPWOOD, J. M.; CHEXAL, B. **Multidimensional Analysis of the Chernobyl accident**. Canada: Atomic Energy of Canada Limited and Electric Power Research Institute AECL-9604, 1988.
- CURTISS, C.; HIRSCHFELDER, J. Integration of stiff equation. **Anais da Academia Nacional de Ciências dos Estados Unidos da América**, USA, v.38 (3), p.235 – 243, 1952.
- DAHLQUIST, G. A special stability problem for linear multistep methods. **BIT Numerical Mathematics**, ROYAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY, STOCKHOLM, SWEDEN, v.3, 1963.

DUDERSTADT, J.; HAMILTON, L. **Nuclear Reactor Analysis**. New York: John Wiley & Sons, 1976.

ESPINOSA, C. E. **Modelagem e Simulação dos venenos no combustível nuclear em cenário com duas escalas de tempo**. 2016. Tese de Doutorado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

FLETCHER, C.; CHAMBERS, R.; BOLANDER, M.; DALLMAN, R. Simulation of the Chernobyl accident. **Nuclear Engineering and Design**, [S.l.], v.105(2), p.157 – 172, 1988.

GALINA, G. **Sistemas Rígidos Associados a Cadeias de Decaimento Radioativo**. 2016. Dissertação de Mestrado — IME-USP, São Paulo.

GANAPOL, B. D. A highly accurate algorithm for the solution of the point kinetics equations. **Annals of Nuclear Energy**, 0306-4549, v.62, p.564 – 571, 2013.

GUPTA, M. M.; MANOHAR, R. P.; STEPHENSON, J. W. High-order difference schemes for two-dimensional elliptic equations. **Numerical Methods for Partial Differential Equations**, n.1, v.1, p.71 – 80, 1985.

INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. Vienna: Environmental Consequences of the Chernobyl Accident and their Remediation: Twenty Years of Experience, 2006. n.8. (Radiological Assessment Reports Series).

KAPS, P.; RENTROP, P. Generalized Runge-Kutta methods of order four with stepsize control for stiff ordinary differential equations. **Numerische Mathematik**, 0029-599X, n.1, v.33, p.55 – 68, 1979.

KAPS, P.; WANNER, G. A Study of Rosenbrock-Type Methods of High Order. **Numerische Mathematik**, Berlin, Heidelberg, v.38, n.2, p.279 – 298, June 1981.

KEEPIN, G. R. **Physics of Nuclear Kinetics**. Reading. Mass.: Addison-Wesley, 1965.

KINARD, M.; ALLEN, K. E. J. Efficient numerical solution of the point kinetics equations in nuclear reactor dynamics. **Annals of Nuclear Energy**, 0306-4549, n.9, v.31, p.1039 – 1051, 2004.

KNOBEL, M. e. a. **Domínio da energia nuclear vem de teorias do século XIX**.

LAMARSH, J. R. **Introduction to Nuclear Reactor Theory**. New York: Wesley publishing company, 1966.

LAMBERT, J. D. **Numerical Methods for Ordinary Differential Systems: The Initial Value Problem**. USA: John Wiley Sons, Inc., 1991.

MOHIDEEN ABDUL RAZAK, M.; RATHINASAMY, N. Haar wavelet for solving the inverse point kinetics equations and estimation of feedback reactivity coefficient under background noise. **Nuclear Engineering and Design**, 0029-5493, v.335, p.202 – 209, 2018.

NAHLA, A. A. An efficient technique for the point reactor kinetics equations with Newtonian temperature feedback effects. **Annals of Nuclear Energy**, 0306-4549, n.12, v.38, p.2810 – 2817, 2011.

PAGANIN, T.; BODMANN, B.; VILHENA, M. On a point kinetic model for nuclear reactors considering the variation in fuel composition. **Progress in Nuclear Energy**, 0149-1970, v.118, p.103 – 134, 2020.

PAGANIN, T. M. **Modelo de Cinética Pontual em reatores nucleares considerando variação na composição do combustível e duas escalas de tempo**. 2018. Dissertação de Mestrado — PPGMEM/UFRGS, Porto Alegre.

PETERSEN, C. Z. **Aplicação da transformada de Laplace para determinação de condições de contorno tipo albedo para cálculos neutrônicos**. 2008. Dissertação de Mestrado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

PETERSEN, C. Z. **Solução analítica das equações da cinética pontual e espacial da teoria de difusão de nêutrons pelas técnicas da GITT e decomposição**. 2011. Tese de Doutorado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

PICCA, P.; FURFARO, R.; GANAPOL, B. A highly accurate technique for the solution of the non-linear point kinetics equations. **Annals of Nuclear Energy**, 0306-4549, v.58, p.43 – 53, 2013.

RHODES, R. **The Making of the Atomic Bomb**. Nova York: Simon e Schuster, 1986.

ROSENBROCK, H. H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. **The Computer Journal**, n.4, v.5, p.329 – 330, 01 1963.

SCHIPPMANN, B.; BURCHARD, H. Rosenbrock methods in biogeochemical modelling – A comparison to Runge–Kutta methods and modified Patankar schemes. **Ocean Modelling - OCEAN MODEL**, Gemany, v.37, p.112 – 121, 12 2011.

SCHOLZ, S. J. D. Lambert, Computational Methods in Ordinary Differential Equations. (Introductory Mathematics for Scientists and Engineers). **ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik**, 10.1002/zamm.19740540726, v.54, n.7, p.523 – 523, 1974.

SEHNEM, R. **Modelagem numérica para a obtenção de mecanismos reduzidos via método de Rosenbrock: a combustão do metano.** 2018. Dissertação de Mestrado — PPGMM/UFPel, Pelotas.

SILVA, D. E. da. **Acidente de chernobyl (causas e consequências).** Rio de Janeiro: Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN), 1986.

SILVA, J. J. A. **Cinética Pontual com Realimentação de Temperatura considerando um grupo de precursores de nêutrons atrasados.** 2011. Dissertação de Mestrado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

TASHAKOR, S.; JAHANFARNIA, G.; HASHEMI-TILEHNOEE, M. Numerical solution of the point reactor kinetics equations with fuel burn-up and temperature feedback. **Annals of Nuclear Energy**, 10.1016/j.anucene.2009.10.013, v.37, p.265 – 269, 02 2010.

TUMELERO, F. **Solução das Equações da Cinética Pontual de Nêutrons com e sem Retroalimentação de Temperatura pelo Método da Aproximação Polinomial.** 2015. Dissertação de Mestrado — PPGMM/UFPel, Pelotas.

TUMELERO, F. **Representação analítica da solução do problema de Cinética de Difusão de Nêutrons em geometria cartesiana unidimensional livre de rigidez.** 2019. Tese de Doutorado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

WILLIAMS, M. Neutron Physics, Paul Reuss, EDP Sciences (2008) 669 pp. **Annals of Nuclear Energy**, 10.1016/j.anucene.2010.06.001, v.37, p.1626 – 1627, 11 2010.

WOOD, J. **Nuclear Power.** Londres: Institution of Engineering and Technology, 2007.

XAVIER, A.; LIMA, A.; VIGNA, C.; VERBI, F.; BORTOLETO, G.; GORAIEB, K.; COLLINS, C.; BUENO, M. Marcos da história da radioatividade e tendências atuais. **Química Nova - QUIM NOVA**, 10.1590/S0100-40422007000100019, v.30, 02 2007.

YANG, X.; JEVREMOVIC, T. Revisiting the Rosenbrock numerical solutions of the reactor point kinetics equation with numerous examples. **Nuclear Technology and Radiation Protection**, 10.2298/NTRP0901003Y, v.24, p.3 – 12, 04 2009.

YOSHIDA, K.; TANABE, F.; HIRANO, M.; KOHSAKA, A. Analyses of Power Excursion Event in Chernobyl Accident with RETRAN Code. **Journal of Nuclear Science and Technology**, [S.l.], v.23, n.12, p.1107 – 1109, 1986.

Solução das equações da Cinética Pontual de Nêutrons com efeitos de temperatura e venenos: Um estudo de caso do acidente em Chernobyl – Natália Barros Schaun

Barros Schaun

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática

Dissertação

Solução das equações da Cinética Pontual de Nêutrons com efeitos de temperatura e venenos: Um estudo de caso do acidente em Chernobyl

NATÁLIA BARROS SCHAUN

Pelotas, 2021